



PLANTA DE PRODUCCIÓ DE PARACETAMOL

Elisabet Burrull Casanovas

Maria Buxó Portet

Andrés Gómez Cobo

Alba Secanell Roca

PROJECTE FINAL DE CARRERA

Enginyeria Química 2009

Tutor: Julián Carrera

VOLUM IV

11. MANUAL DE CÀLCUL

11. MANUAL DE CàLCUL

11.1. Disseny dels tancs d'emmagatzematge i cubetes de retenció	11-1
11.1.1. Disseny funcional dels tancs d'emmagatzematge de fenol	11-1
11.1.2. Disseny funcional dels tancs d'emmagatzematge d'àcid nítric	11-9
11.1.3. Disseny funcional dels tancs d'emmagatzematge d'anhidre acètic	11-11
11.1.4. Disseny funcional dels tancs d'emmagatzematge d'àcid acètic	11-14
11.1.5. Disseny funcional dels tancs d'emmagatzematge d'èter isopropílic	11-17
11.1.6. Disseny funcional de les cubetes de retenció	11-19
11.2. Disseny dels tancs de mescla i tancs de dissolució	11-25
11.2.1. Disseny del tanc de dissolució d'àcid nítric M-301a	11-25
11.2.2. Disseny del tanc de mescla M-401a	11-25
11.2.3. Disseny del tanc de dissolució p-nitrofenol M-301b	11-29
11.2.4. Disseny del tanc de mescla M-302b	11-31
11.2.5. Disseny del tanc de dissolució M-401b	11-33
11.3. Disseny dels reactors	11-35
11.3.1. Disseny del reactor de producció de p-nitrofenol	11-35
11.3.2. Disseny del tanc pulmó M-302a	11-47
11.3.3. Disseny del reactor de producció de paracetamol	11-49
11.4. Disseny dels bescanviadors de calor	11-58
11.4.1. Disseny dels bescanviadors de calor de carcassa i tubs	11-58
11.4.2. Disseny dels bescanviadors de calor de doble tub	11-70
11.5. Disseny de les columnes de destil·lació	11-79
11.5.1. Mètode short-cut	11-79
11.5.2. Disseny funcional i mecànic de la columna C-401a	11-79
11.5.3. Disseny funcional i mecànic de la columna C-401b	11-89
11.6. Disseny de la columna d'arrossegament amb vapor	11-97
11.6.1. Disseny funcional i mecànic de la columna C-402a	11-97
11.7. Disseny de l'evaporador	11-102
11.7.1. Disseny funcional i mecànic de l'evaporador	11-102
11.8. Disseny de l'extracció	11-105
11.8.1. Disseny funcional i mecànic de l'extracció	11-105

11.9. Disseny dels condensadors i bescanviadors de calor tipus Kettle-Reboiler	11-118
11.9.1. Disseny funcional dels condensadors	11-118
11.9.2. Disseny funcional dels bescanviadors tipus Kettle-Reboiler	11-129
11.10. Disseny dels cristal·litzadors	11-134
11.10.1. Disseny funcional i mecànic dels cristal·litzadors	11-134
11.11. Disseny dels ciclons	11-150
11.11.1. Disseny funcional dels ciclons i filtres nucha	11-150
11.11.2. Dimensionament i disseny mecànic dels ciclons	11-152
11.12. Disseny de les sitges d'emmagatzematge de paracetamol	11-161
11.12.1. Disseny funcional de les sitges d'emmagatzematge de paracetamol	11-161
11.13. Disseny i elecció de bombes	11-167
11.13.1. Disseny funcional de les bombes	11-167
11.14. Disseny de ventiladors i compressors	11-172
11.14.1. Disseny funcional de ventiladors i compressors	11-172
11.15. Serveis	11-174
11.15.1. Electricitat	11-174
11.15.2. Generació de vapor, consum de gas natural i oli tèrmic	11-175
11.15.3. Aigua de torre de refrigeració	11-176
11.15.4. Circuit frigorífic	11-177

11. MANUAL DE CÀLCUL

11.1. DISSENY DELS TANCS D'EMMAGATZEMATGE I CUBETES DE RETENCIÓ

11.1.1. Disseny funcional dels tancs d'emmagatzematge de fenol

- Càlcul del nombre de tancs

Per a realitzar el disseny dels tancs d'emmagatzematge s'han de fer uns càlculs i unes suposicions prèvies referents a la capacitat dels camions cisterna que es necessiten per als nostres requeriments. Primer de tot, es parteix que per a produir 6000Tn/any de paracetamol es necessiten 15,92 Tn/d de fenol, i suposant que cada camió conté 15 m³ de fenol es poden calcular la quantitat d'aquests al dia:

$$15,92 \frac{\text{Tn fenol}}{\text{d}} \cdot \frac{1 \text{ L}}{1,06 \text{ kg}} \cdot \frac{1 \text{ m}^3}{1000 \text{ L}} \cdot \frac{1000 \text{ kg}}{1 \text{ Tn}} \cdot \frac{1 \text{ camió}}{15 \text{ m}^3} = 1,001 \frac{\text{camions}}{\text{d}} \cong 1 \frac{\text{camió}}{\text{d}}$$

S'observa que tant sols es necessita un camió al dia de 15 m³ de fenol. Establint que hi pot haver la possibilitat d'emmagatzemar el fenol de 3 dies de producció (ja que s'han de tenir en compte els caps de setmana i dies festius que els camions no treballen), el volum total d'aquest és:

$$15,92 \frac{\text{Tn fenol}}{\text{d}} \cdot \frac{1 \text{ L}}{1,06 \text{ kg}} \cdot \frac{1 \text{ m}^3}{1000 \text{ L}} \cdot \frac{1000 \text{ kg}}{1 \text{ Tn}} \cdot 5 \text{ dies} = 74,72 \text{ m}^3 \text{ de fenol}$$

Aquest és el volum requerit de fenol. S'aplica un sobredimensionament del 15% ja que els tancs no poden buidar-se del tot, i el resultat és 51,81 m³.

A partir d'aquí, s'ha de calcular el nombre de tancs necessaris per emmagatzemar tot aquest volum de fenol. Es suposa que es disposa de tancs cilíndrics amb un diàmetre de 2,5 m i una alçada de líquid (ja que no estarà ple del tot) de 3,5 m per a cada tanc. Per tant, el volum de líquid al tanc és:

$$V_{\text{líquid}} = \frac{\pi}{4} \cdot D^2 \cdot h_{\text{líquid}} = \frac{\pi}{4} \cdot 2,5^2 \cdot 3,5 = 17,18 \text{ m}^3$$

Ara ja es poden calcular el nombre de tancs:

$$n^{\circ} \text{ de tancs} = \frac{V_{\text{total de fenol}}}{V_{\text{fenol a cada tanc}}} = \frac{74,72 \text{ m}^3}{17,18 \text{ m}^3} = 3,02 \text{ tancs} \rightarrow 3 \text{ tancs}$$

El volum del tanc serà el següent suposant que aquest té una alçada de 4m:

$$V_{\text{tanc}} = \frac{\pi}{4} \cdot D^2 \cdot h_{\text{tanc}} = \frac{\pi}{4} \cdot 2,5^2 \cdot 4 = 19,63 \text{ m}^3$$

- **Càlcul de la pressió de disseny**

Per a calcular la pressió que han de suportar els tancs d'emmagatzematge es suposa que aquesta és la que exerceix el sòlid al fons del tanc:

$$\Delta P_{\text{rel}} = \rho \cdot g \cdot h_{\text{liquid}} = 1,06 \frac{\text{kg}}{\text{L}} \cdot \frac{1000 \text{ L}}{1 \text{ m}^3} \cdot 9,81 \frac{\text{m}}{\text{s}^2} \cdot 3,5 \text{ m} = 36395,1 \text{ Pa} = 0,36 \text{ bar}$$

Aquesta és la pressió relativa, per a saber l'absoluta se li suma la pressió atmosfèrica:

$$\Delta P_{\text{abs}} = \Delta P_{\text{rel}} + P_{\text{atm}} = 0,36 \text{ bar} + 1,013 \text{ bar} = 1,61 \text{ bar}$$

En aquesta pressió se li aplica un sobredimensionament del 15% per assegurar-se que el sistema funcionarà correctament:

$$P_{\text{disseny}} = \Delta P_{\text{abs}} + \Delta P_{\text{abs}} \cdot \frac{15}{100} = \mathbf{1,76 \text{ bar}}$$

- **Material de construcció**

Per tal d'escollir el tipus de material de construcció s'ha consultat a les taules del *Harrington Industrial Plastics*, les quals et proporcionen la compatibilitat dels diferents materials per a cada tipus de producte. S'ha vist que la majoria dels compostos coincideixen amb l'excel·lent compatibilitat de l'aleació d'acer inoxidable **AISI 304**, el qual és un material força comú en la indústria química. Per tant, si no es diu el contrari, tota l'estona s'utilitzarà aquest material de construcció.

- **Càlcul del gruix de la paret del tanc**

Per al càlcul del gruix de la paret del tanc d'emmagatzematge s'ha utilitzat el codi ASME per a l'expressió d'un cilindre. A continuació es mostra el procediment:

$$t = \frac{P \cdot D_i}{2 \cdot S \cdot E - 1,2 \cdot P} + C_1 + C_2$$

On:

t: gruix del tanc (mm)

D_i: diàmetre intern (mm)

P: pressió de disseny (bar)

S: límit elàstic; S=1650bar (per una T=50°C i material AISI 304)

E: factor de soldadura (soldadura en X i radiografiat parcial); E=0,85

C₁: sobreessessor per corrosió (mm); C₁=1mm

C₂: tolerància de fabricació (mm); C₂=0

El gruix necessari per a la paret del tanc és de 2,57mm; però degut a que a que es té un diàmetre de tanc de 2,5m, el gruix mínim que s'ha de tenir és de **9mm**, per tant es tria aquest gruix.

1. **Càlcul del gruix inferior pla:** Aquesta expressió és per al càlcul del gruix inferior pla:

$$t = 6,5 + C_1 = 7,5 \rightarrow \mathbf{8mm}$$

2. **Càlcul del gruix superior toriesfèric**

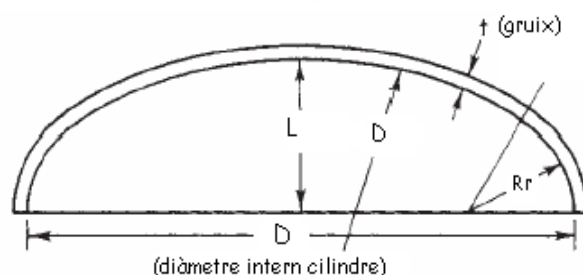


Figura 11.1.1. Fons toriesfèric

S'escull que la relació L/r és de 16,67; per tant, l'expressió corresponent per al càlcul del gruix és:

$$t = \frac{0,885 \cdot P \cdot L}{S \cdot E - 0,1 \cdot P} + C_1 + C_2$$

On:

L: diàmetre intern del reactor (mm)

C₂: en aquest cas la sobreessessor per corrosió es considera que és 0,1·t.

El gruix del fons superior és de 2,89mm, o sigui que s'escull una xapa de **3mm**. S'ha de dir que la pressió de disseny per al fons superior es considera que és una atmosfera (ja que no hi ha líquid sobre aquest que exerceixi una pressió).

Per al disseny mecànic d'un equip a pressió, s'han de tenir en compte els esforços majors que actuen sobre aquests, els quals són:

- **Pes total de l'equip buit**

En aquest cas es valora quant pesa l'equip quan està buit, ja que el seu pes no serà el mateix que quan està ple.

Primer de tot es calcula el pes de la paret:

$$\text{Pes}_{\text{buitparet}} = A_{\text{anul·lar}} \cdot h_{\text{cilindre}} \cdot \rho_{\text{material}} \quad \text{on,}$$

$$A_{\text{anul·lar}} = \frac{\pi}{4} \cdot (D_e^2 - D_i^2) \quad ; \quad h_{\text{cilindre}} = h_{\text{tanc}} - h_{\text{toriesfèric}} = h_{\text{tanc}} - \left[D_i - \sqrt{(D_i - r)^2 - \left(\frac{D_i}{2} - r \right)^2} \right]$$

L'àrea anul·lar dóna un valor de 0,07m², l'alçada del toriesfèric de 0,42m i la del cilindre de 3,58m; per tant, s'obté un pes de la paret de **2037,4kg** considerant que la densitat del material és de 8,03g/cm³.

1. Pes del fons inferior pla

L'expressió per al càlcul és la següent:

$$\text{Pes}_{\text{fonsinferior}} = A_{\text{fons}} \cdot t_{\text{fons}} \cdot \rho_{\text{material}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_i^2 \cdot t_{\text{fons}} \cdot \rho_{\text{material}}$$

El pes obtingut és de **315,34kg**.

2. Pes del fons superior toriesfèric

Per al càlcul del pes del toriesfèric, primer s'ha de calcular el volum d'aquest:

$$V_{\text{toriesfèric}} = V_{\text{ext}} - V_{\text{int}} = 0,0809 \cdot D_{e,\text{tori}}^3 - 0,0809 \cdot D_i^3 = 9,12 \cdot 10^{-3} \text{m}^3 \quad \text{on,}$$

D_{e,tori}: diàmetre extern del toriesfèric, o sigui, D_i+2t_{toriesfèric}

Una vegada calculat el volum, es pot trobar el pes:

$$\text{Pes}_{\text{tori}} = V_{\text{tori}} \cdot \rho_{\text{material}} = \mathbf{73,26kg}$$

Per tant, el pes total de l'equip és: **2426kg**

- **Pes de l'aparell i el seu contingut en condicions de prova (amb aigua)**

Abans de posar el producte desitjat, els equips són provats amb aigua, per tant, també s'ha de calcular el seu pes quan aquest està ple d'aigua:

$$Pes_{equip,aigua} = P_{equip} + V_{aigua} \cdot \rho_{aigua} = \mathbf{19606,6kg}$$

$$\text{On: } V_{aigua} = \frac{\pi}{4} \cdot D_i^2 \cdot h_{liquid} = 17,18m^3$$

- **Pes de l'aparell i el seu contingut**

El procediment és el mateix que en el cas de l'aigua:

$$Pes_{equip,fend} = P_{equip} + V_{fend} \cdot \rho_{fend} = \mathbf{20637,5kg \text{ on,}}$$

$$V_{fend} = \frac{\pi}{4} \cdot D_i^2 \cdot h_{liquid} = 17,18m^3$$

- **Càlcul del serpentí**

Degut que aquest reactiu arriba en estat líquid i es vol mantenir a aquest estat, s'ha de disposar d'un sistema que mantingui el tanc per sobre de la temperatura de fusió (42°C), per tant, s'escull escalfar-ho a 50°C. S'ha triat col·locar un serpentí utilitzant oli tèrmic a 100°C per a dur a terme l'intercanvi de calor.

El primer que s'ha de calcular és el calor que es perdria per convecció natural si no es tingués el serpentí. Abans, però, s'han de calcular els coeficients individuals i global de transferència de calor per al cas de convecció natural. Es pot veure a la bibliografia (Perry's) que per al cas de líquids orgànics i aire es pot utilitzar següent equació:

$$h = b \cdot (\Delta T)^m \cdot L^{3m-1}$$

On:

h: coeficient individual de transferència de calor (W/m²°C)

b: coeficient que depèn del fluid respecte el qual fa referència (Perry's)

ΔT: increment de temperatura

m: coeficient que depèn de la geometria de l'equip (Perry's)

L: alçada de l'equip (m)

A la **taula 11.1.1.a.** es mostren les dades que s'han utilitzat per a calcular el coeficient de transferència de calor interior i exterior:

	Interior	Exterior
Fluid	Fenol	Aire
b	59	1,24
ΔT	45	45
m	0,25	0,33
L (m)	4	4
h (W/m²°C)	108,05	4,41

Taula 11.1.1.a. Càlcul del coeficient de transferència de calor.

L'increment de temperatura s'ha escollit la més desfavorable, considerant que a l'exterior hi ha una temperatura de 5°C i a l'interior de 50°C.

A continuació ja es pot calcular el coeficient global de transferència de calor per convecció natural:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_i \cdot \frac{D_i}{D_i}} + \frac{1}{h_e \cdot \frac{D_e}{D_i}} + \frac{\Delta x_{\text{gruix}}}{k_{\text{material}} \cdot \frac{D_{\text{ml,gruix}}}{D_i}} + \frac{\Delta x_{\text{aïllant}}}{k_{\text{aïllant}} \cdot \frac{D_{\text{ml,aïllant}}}{D_i}}$$

On:

U: coeficient global de transferència de calor (W/m²°C)

h_i: coeficient individual de transferència de calor interior (W/m²°C)

h_e: coeficient individual de transferència de calor exterior (W/m²°C)

Δx_{gruix} : gruix del cilindre (m)

$\Delta x_{\text{aïllant}}$: gruix de l'aïllant (0,01m)

D_i: diàmetre intern cilindre (m)

D_e: diàmetre extern cilindre (m)

D_{ml,gruix}: mitjana logarítmica respecte el diàmetre intern i l'extern

D_{ml,aïllant}: mitjana logarítmica respecte el diàmetre intern i l'extern tenint en compte el gruix

k_{material}: conductivitat tèrmica del material (AISI 304) (16W/m°C)

k_{aïllant}: conductivitat tèrmica de l'aïllant (*manta spindex 322-G-70*) (0,03W/m°C)

Finalment, el coeficient global per convecció és de **1,77W/m²°C**.

Seguidament s'ha de calcular l'àrea total de bescanvi de calor, que serà la suma de l'àrea lateral més els dos fondos:

$$A_{\text{total}} = A_{\text{lateral}} + 2 \cdot A_{\text{fondo}} = \pi \cdot D_i \cdot h_{\text{tanc}} + 2 \cdot \left(\frac{\pi}{4} \cdot D_i^2 \right) = 41,23 \text{ m}^2$$

Amb això ja es pot calcular la calor total que s'ha de bescanviar:

$$q = U \cdot A \cdot \Delta T = 3279,7W$$

Una vegada obtinguda la calor a bescanviar, es calcula el cabal d'aigua refrigerant que s'ha d'utilitzar:

$$q = m \cdot C_p \cdot \Delta T$$

On:

C_p : calor específic de l'oli tèrmic (J/kg°C)

ΔT : increment de temperatures de l'oli tèrmic (100-85=15°C)

m : cabal màssic d'aigua refrigerant (kg/s)

S'ha obtingut un cabal de **361,54kg/h**, i a continuació s'han de calcular les dimensions del serpentí. Primer es calcula l'àrea que ha de tenir el serpentí:

$$q = U \cdot A \cdot DTML$$

El calor bescanviat ha de ser el mateix que el que s'ha calculat i el coeficient global en aquest cas no és el mateix, perquè ara no fa referència a la convecció sinó a la transferència de calor entre el serpentí i el fluid de dins del tanc. S'han buscat valors típics a la bibliografia per al cas de serpentins i tenir fenol com a fluid de procés i aigua com a fluid refrigerant i s'ha escollit un valor de 200 W/m²°C.

La DTML es calcula de la següent forma:

$$DTML = \frac{(T - T_E) - (T - T_S)}{\ln\left(\frac{(T - T_E)}{(T - T_S)}\right)} = 42,05$$

On:

T : temperatura que es vol mantenir (50°C)

T_E : temperatura d'entrada de l'oli tèrmic (100°C)

T_S : temperatura de sortida de l'oli tèrmic (85°C)

Per tant, l'àrea que ha de tenir el serpentí ($A_{\text{serpentí}}$) és de **0,39m²**. Aquesta àrea ha d'envoltar tot el líquid, ja que sinó només s'assoliria la temperatura desitjada als voltants del serpentí, de manera que es fixen les dimensions d'aquest que es mostren a la **taula 11.1.1.b.**:

Alçada ($h_{\text{serpentí}}$) (m)	2
Amplada ($w_{\text{serpentí}}$) (m)	1
Distància entre tubs ($D_{\text{entre tubs}}$) (m)	0,4
Diàmetre de tub (D_{tub}) (mm)	10

Taula 11.1.1.b. Dimensions del serpentí.

Amb aquestes dimensions, es calcula el màxim nombre de voltes que hi pot haver, i les que realment es necessiten:

$$n^{\circ} \text{màxim de voltes} = \frac{h_{\text{serpentí}}}{(D_{\text{tub}} + D_{\text{entretubs}})} = 4,87 \approx 4$$

$$n^{\circ} \text{voltes} = \frac{A_{\text{total bescanvi}}}{A_{\text{bescanvi 1 tub}}} = \frac{A_{\text{total bescanvi}}}{\pi \cdot D_{\text{tub}} \cdot L_{\text{tub}}} = \frac{A_{\text{total bescanvi}}}{\pi \cdot (\pi \cdot w_{\text{serpentí}}) \cdot L_{\text{tub}}} = 3,95 \approx 4$$

Com que es veu que amb aquestes mides ja es té prou espai per col·locar el serpentí, de moment es donen com a bones. Una altra comprovació que s'ha de fer és la velocitat de pas de l'aigua de refrigeració:

$$v_{\text{pas}} = \frac{Q_v}{A_{\text{pas}}} = \frac{\frac{m}{\rho_{\text{refrigerant}}}}{\frac{\pi \cdot D_{\text{tub}}^2}{4}} = \frac{1,24 \cdot 10^{-4} \frac{\text{m}^3}{\text{s}}}{7,85 \cdot 10^{-5} \text{m}^2} = 1,58 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

S'observa que la velocitat de pas està dins dels rangs típics (1,5-2,5m/s); per tant, es considera el disseny com a vàlid.

Per a saber el pes del serpentí buit, s'utilitza la següent expressió:

$$\text{Pes}_{\text{serpentí}} = A_{\text{pas}} \cdot L_{\text{serpentí}} \cdot \rho_{\text{material}} = A_{\text{pas}} \cdot \frac{A_{\text{serpentí}}}{\pi \cdot D_{\text{serpentí}}} \cdot \rho_{\text{material}} = 7,93 \text{kg}$$

- **Càlcul de l'aïllant**

Degut a que el tanc es trobarà a una temperatura de 50°C, s'ha de posar un aïllant més que res perquè a l'hivern no sigui tant pronunciat el contrast entre la temperatura ambient i els 50°C. De cara a l'estiu com que es poden arribar a temperatures fins a 40°C, aquesta diferència no és tan considerable, de manera que la temperatura de la superfície d'aquest serà similar. Seguint els passos del programa ISOVER, s'ha obtingut un gruix d'aïllant de **10mm** considerant que el revestiment exterior és xapa pintada i que l'aïllant és *manta spindex 322-G-70*.

- **Càlcul del venteig**

La norma *MIE-APQ-001* estipula que tots els tancs d'emmagatzematge han de disposar d'un sistema de venteig. Els requeriments d'aquest es calculen de la següent forma:

$$S_{\text{humida}} = \pi \cdot D_{i,\text{tanc}} \cdot h_{\text{tanc}} \cdot \frac{\% \text{ocupació}}{100} = 27,49 \text{m}^2$$

On:

$$\%ocupació = \frac{V_{líquid}}{V_{tanc}} \cdot 100 = 87,5\%$$

S_{humida} : superfície humida (m^2)

A partir de la superfície humida, la **taula 11.1.1.c.** proporcionada per la norma esmentada anteriorment especifica els requeriments del venteig en funció d'aquesta:

Superfície humida (m^2)	m^3/h d'aire	Superfície humida (m^2)	m^3/h d'aire	Superfície humida (m^2)	m^3/h d'aire
2	636	20	6.360	90	14.408
4	1.272	25	6.978	100	15.293
6	1.908	30	7.736	120	16.000
8	2.544	35	8.441	140	16.846
10	3.180	40	9.104	160	17.624
12	3.816	50	10.330	180	18.340
14	4.452	60	11.453	200	19.000
16	5.088	70	12.497	230	19.924
18	5.724	80	13.478	260	20.767

Taula 11.1.1.c. *Requeriments de venteig per tancs a pressió atmosfèrica*

(*) Els cabals d'aire són a pressió atmosfèrica i a 15°C.

Per assegurar una bona ventilació, es mira la superfície humida corresponent a 30m² i es veu que serien necessaris **7736 m³/h d'aire**.

11.1.2. Disseny funcional dels tancs d'emmagatzematge d'àcid nítric

- **Càlcul del nombre de tancs**

Es necessiten 25,58 Tn/d de nítric, i suposant que cada camió conté 30 m³ d'aquest es poden calcular la quantitat de camions necessaris al dia:

$$25,58 \frac{\text{Tn nítric}}{\text{d}} \cdot \frac{1 \text{ L}}{1,520 \text{ kg}} \cdot \frac{1 \text{ m}^3}{1000 \text{ L}} \cdot \frac{1000 \text{ kg}}{1 \text{ Tn}} \cdot \frac{1 \text{ camió}}{30 \text{ m}^3} = 0,56 \frac{\text{camions}}{\text{d}} \cong 1 \frac{\text{camió}}{2 \text{ d}}$$

S'observa que tant sols es necessita un camió de 30 m³ cada dos dies de nítric. Establint que hi pot haver la possibilitat d'emmagatzemar el nítric de 3 dies de producció (ja que s'han de tenir en compte els caps de setmana i dies festius que els camions no treballen), el volum total d'aquest és:

$$25,58 \frac{T_{\text{nítric}}}{d} \cdot \frac{1L}{1,52kg} \cdot \frac{1m^3}{1000L} \cdot \frac{1000kg}{1Tn} \cdot 3 \text{ dies} = 41,37m^3 \text{ de nítric}$$

Aquest és el volum requerit de nítric. S'aplica un sobredimensionament del 15% ja que els tancs no estaran plens fins dalt, i el resultat és 47,58 m³.

A partir d'aquí, s'ha de calcular el nombre de tancs necessaris per emmagatzemar tot aquest volum de nítric. Es suposa que es disposa de tancs cilíndrics amb un diàmetre de 2,5 m i una alçada de líquid (ja que no estarà ple del tot) de 3 m per a cada tanc. Per tant, el volum del líquid al tanc és:

$$V_{\text{liquid}} = \frac{\pi}{4} \cdot D^2 \cdot h_{\text{liquid}} = \frac{\pi}{4} \cdot 2,5^2 \cdot 3 = 14,7m^3$$

Ara ja es poden calcular el nombre de tancs:

$$n^{\circ} \text{ de tancs} = \frac{V_{\text{total de nítric}}}{V_{\text{nítrica cada tanc}}} = \frac{47,58m^3}{14,7m^3} = 3,23 \text{ tancs} \rightarrow 3 \text{ tancs}$$

S'aproxima a 3 tancs ja que com que s'ha fet el sobredimensionament, amb 3 tancs s'obté un volum disponible de 51,5m³, el qual es compara amb el volum total que és un 47,58m³ i es veu que ja és suficient.

El volum del tanc serà el següent suposant que aquest té una alçada de 3,5m:

$$V_{\text{tanc}} = \frac{\pi}{4} \cdot D^2 \cdot h_{\text{tanc}} = \frac{\pi}{4} \cdot 2,5^2 \cdot 3,5 = 17,18m^3$$

- **Càlcul de la pressió de disseny**

Es segueix el mateix procediment que en el cas del fenol. Es troba una pressió de **1,68bar**.

- **Càlcul del gruix de la paret del tanc**

S'ha seguit el mateix procediment que el fenol. En aquest cas es troba un gruix de 3,49mm; però degut a que es té un diàmetre de tanc de 2,5m, el gruix mínim que s'ha de tenir és de **9mm**, per tant es tria aquest gruix.

S'ha de dir que en aquest cas s'ha suposat una sobreessessor per corrosió de 2mm, enlloc de l'1mm que s'havia escollit en el cas del fenol, ja que l'àcid nítric és un producte corrosiu.

- **Càlcul del gruix inferior pla**

Es segueix el mateix procediment que en el cas del fenol, s'obté un valor de 8,5mm, el qual arrodonint es queda un gruix típic de **9mm**.

- **Càlcul del gruix superior torisfèric**

El procediment de càlcul és el mateix, i s'ha obtingut un gruix de 3,99mm; que s'aproxima a **4mm**.

- **Pes total de l'equip buit**

El procediment és el mateix, i els resultats són els següents:

$$P_{\text{total}} = P_{\text{cilindre}} + P_{\text{inferiorpla}} + P_{\text{torisfèric}} = 1752,62 + 354,75 + 97,76 = \mathbf{2205,13kg}$$

- **Pes de l'aparell i el seu contingut en condicions de prova (amb aigua)**

Es segueix el mateix mètode del fenol, i els resultats són:

$$P_{\text{equipaigua}} = P_{\text{equip}} + V_{\text{aigua}} \cdot \rho_{\text{aigua}} = \mathbf{16931,34kg}$$

- **Pes de l'aparell i el seu contingut**

Es segueix el mateix mètode del fenol, però tenint en compte que la densitat de l'àcid nítric és de 1520 kg/m³.

Els resultats són:

$$P_{\text{equip,nítric}} = P_{\text{equip}} + V_{\text{nítric}} \cdot \rho_{\text{nítric}} = \mathbf{24588,9kg}$$

11.1.3. Disseny funcional dels tancs d'emmagatzematge d'anhidre acètic

- **Càlcul del nombre de tancs**

Els càlculs s'han fet de la mateixa manera que en els casos anteriors. Partint del cabal màssic d'anhidre acètic que és necessari cada hora, el qual és de 657,9 kg/h i suposant també que la capacitat del camió serà de 20m³, el nombre d'aquests necessaris al dia són 0,73; que s'aproxima a **1 camió/dia**. Tenint en compte que es dimensionen els tancs perquè puguin emmagatzemar les necessitats de la planta per a 3 dies, el volum requerit per aquests aplicant un sobredimensionament del 15% és de **50,44m³**.

Per tal de saber les dimensions del tanc i quants se'n necessita, a la **taula 11.1.3.a.** es mostren el resultats obtinguts:

D _{tanc} (m)	h _{líquid} (m)	h _{tanc} (m)	V _{líquid} (m ³)	V _{tanc} (m ³)	Nº tancs
2,5	4,5	5	21,93	24,54	2,05 ≈ 2

Taula 11.1.3..a. Dimensions del tanc d'emmagatzematge d'anhidre acètic

- **Càlcul de la pressió de disseny**

Es segueix el mateix procediment que en els casos anteriors i s'obté una pressió de disseny de **1,70 bar**.

- **Càlcul del gruix de la paret del tanc**

S'ha seguit el mateix procediment que el fenol, però en aquest cas s'ha escollit com a material de construcció un altre tipus d'acer inoxidable, ja que l'AISI 304 no serveix per emmagatzemar aquest producte, per tant, s'ha triat l'aleació AISI 316. Per tant, hi ha un paràmetre per al càlcul del gruix que canvia, que és el límit elàstic. En aquest cas és de 1750 bar, i es troba un gruix (suposant 1mm de tolerància de corrosió) de 2,44mm, que degut a que es té un diàmetre de tanc de 2,5m, el mínim que s'ha de tenir és de **9mm**, per tant es tria aquest gruix.

- **Càlcul del gruix inferior pla**

Es segueix el mateix procediment que en el cas del fenol, s'obté un valor de 7,5mm, el qual arrodonint es queda un gruix típic de **8mm**.

- **Càlcul del gruix superior toriesfèric**

El procediment de càlcul és el mateix, i s'ha obtingut un gruix de 2,78mm; que s'aproxima a 3mm.

- **Pes total de l'equip buit**

El procediment és el mateix, l'única cosa que canvia és la densitat del material, que en aquest cas és de 7990 kg/m³ per a l'AISI 316. Els resultats són els següents:

$$P_{\text{total}} = P_{\text{cilindre}} + P_{\text{inferiorpla}} + P_{\text{toriesfèric}} = 2594,03 + 315,76 + 73,89 = \mathbf{2980,68kg}$$

- **Pes de l'aparell i el seu contingut en condicions de prova (amb aigua)**

Es segueix el mateix mètode del fenol, i els resultats són:

$$P_{\text{equip,aigua}} = P_{\text{equip}} + V_{\text{aigua}} \cdot \rho_{\text{aigua}} = \mathbf{24911,33kg}$$

- **Pes de l'aparell i el seu contingut**

Es segueix el mateix mètode del fenol, però tenint en compte que la densitat de l'anhidre acètic és de 1080 kg/m³. Els resultats són:

$$P_{\text{equip,anhidre}} = P_{\text{equip}} + V_{\text{anhidre}} \cdot \rho_{\text{anhidre}} = \mathbf{26665,78kg}$$

- **Càlcul de l'aïllant**

Degut a que l'anhidre acètic té un punt d'inflamació de 49°C, es decideix posar un aïllant per la prevenció que no arribi a aquesta temperatura durant l'estiu. Seguint els passos del programa ISOVER, s'ha obtingut un gruix d'aïllant de **10mm** considerant que el revestiment exterior és xapa pintada i que l'aïllant és *manta spindex 322-G-70*.

- **Càlcul del venteig**

El procediment de càlcul és el mateix que en el cas del fenol, en aquest cas el percentatge d'ocupació és d'un 89,3% i la superfície humida és 35,09m², per tant, mirant a la **taula 11.1.1.c.** es troba un cabal d'aire necessari per al venteig de **8441 m³/h.**

11.1.4. Disseny funcional dels tancs d'emmagatzematge d'àcid acètic glacial

- Càlcul del nombre de tancs**

En aquest cas, els tancs d'emmagatzematge d'àcid acètic no són necessaris per al consum propi, sinó per a emmagatzemar excedents i aquests vendre'ls, ja que durant el procés se'n produeix una quantitat major a la que es necessita. A la **taula 11.1.4.a.** es mostren els cabals d'àcid acètic destinats a cada lloc:

	kg/h	m3/h
Quantitat necessitada	1578,17	1,50
Quantitat produïda	1909,01	1,82
Quantitat venda	330,84	0,32

Taula 11.1.4.a. Cabals d'àcid acètic.

Per tant, per al càlcul del nombre de tancs es partirà de que es produeixen 330,84 kg/h d'àcid acètic que s'han d'emmagatzemar per a una posterior venda. A més a més, s'estipula que la capacitat dels camions que vindran a recollir aquest producte serà de 20 m³, de manera que el nombre de camions necessaris al dia són:

$$n^{\circ}\text{camions} = 0,32 \frac{\text{m}^3\text{acètic}}{\text{h}} \cdot \frac{24\text{h}}{1\text{d}} \cdot \frac{1\text{camió}}{\text{d}} = 0,39 \approx 1 \frac{\text{camió}}{3\text{d}}$$

Es veu que es necessita un camió cada tres dies per a que s'emporti tot l'acètic produït en forma d'excedent.

Per al càlcul del nombre de tancs necessaris s'estableix que aquests tindran una capacitat per emmagatzemar l'acètic destinat a vendes durant 3 dies de producció, per tant, el volum mínim necessari ha de ser de **22,71m³**. Tal i com s'ha comentat anteriorment, això es fa degut a que hi haurà dies festius que els camions no treballaran, per tant això s'ha de tenir en compte. El procediment és el mateix que s'ha comentat en apartats anteriors, per tant, a la **taula 11.1.4.a.** es mostra un resum dels resultats obtinguts:

D _{tanc} (m)	h _{líquid} (m)	h _{tanc} (m)	V _{líquid} (m ³)	V _{tanc} (m ³)	Nº tancs
2,5	2,3	3	11,35	14,73	1,55 ≈ 2

Taula 11.1.4.a. Dimensions del tanc d'emmagatzematge d'àcid acètic glacial

- **Càlcul de la pressió de disseny**

Es segueix el mateix procediment que en els casos anteriors, tot sabent que la densitat de l'àcid acètic glacial és de 1049 kg/m^3 . S'obté una pressió de disseny de **1,54 bar**.

- **Càlcul del gruix de la paret del tanc**

S'ha seguit el mateix procediment que el fenol, i suposant que es té una tolerància de corrosió d'1mm i que el límit elàstic és 1750 bar, ja que s'ha dissenyat utilitzant com a material de construcció l'aleació AISI 316L, s'obté un gruix de 2,29mm, però degut a que es té un diàmetre de tanc de 2,5m, el mínim que s'ha de tenir és de **9mm**, per tant es tria aquest gruix.

- **Càlcul del gruix inferior pla**

Es segueix el mateix procediment que en el cas del fenol, s'obté un valor de 7,5mm, el qual arrodonint es queda un gruix típic de **8mm**.

- **Càlcul del gruix superior toriesfèric**

El procediment de càlcul és el mateix, i s'ha obtingut un gruix de 2,78mm; que s'aproxima a **3mm**.

- **Pes total de l'equip buit**

El procediment és el mateix, i els resultats són els següents:

$$P_{\text{total}} = P_{\text{cilindre}} + P_{\text{inferiorpla}} + P_{\text{toriesfèric}} = 1434,85 + 346,79 + 71,61 = \mathbf{1853,26kg}$$

- **Pes de l'aparell i el seu contingut en condicions de prova (amb aigua)**

Es segueix el mateix mètode del fenol, i els resultats són:

$$P_{\text{es_{equip,aigua}}} = P_{\text{equip}} + V_{\text{aigua}} \rho_{\text{aigua}} = \mathbf{13707,23kg}$$

- **Pes de l'aparell i el seu contingut**

Es segueix el mateix mètode del fenol, i els resultats són:

$$P_{\text{es_{equip,acètic}}} = P_{\text{equip}} + V_{\text{acètic}} \rho_{\text{acètic}} = \mathbf{13763,57kg}$$

- **Càlcul del serpentí**

Aquest reactiu ha d'estar emmagatzemat a 25°C, això és degut a que el flash point d'aquest és 40°C, per tant al voltant d'aquesta temperatura hi ha risc de creació de gasos explosius, i per sota dels 17°C comença a cristal·litzar la qual cosa produiria greus problemes d'operació en el tanc.

Degut a que els tancs estan a l'exterior, es tindran condicions diferents en època estival que en l'hivernal, per tant, s'ha decidit la instal·lació de dos sistemes de bescanvi de calor, un per a cada ocasió. D'aquesta manera, dins de cada tanc d'àcid acètic hi hauran dos serpentins, els quals es posaran en funcionament en funció de la temperatura exterior que es tingui.

Per al disseny dels serpentins, es segueix el mateix procediment que en el cas del fenol, per tant, es posa directament els resultats obtinguts en cada cas:

	Interior	Exterior
Fluid	Àcid acètic	Aire
b	59	1,37
ΔT (*)	20	20
m	0,25	0,25
L (m)	3	3
h (W/m²°C)	94,80	2,20

(*) l'increment de temperatura és amb èpoques hivernals, que són condicions més restrictives.

Taula 11.1.4.b. Càlcul del coeficient de transferència de calor.

A continuació, es calcula el coeficient global de transmissió de calor per al cas de convecció i amb aquests ja es poden saber els requeriments d'aigua de refrigeració i d'aigua calenta (la qual és la que prové del serpentí del reactor R-301B que surt a 40°C):

$U_{convecció}$ (W/m²°C)	1,26	
Àrea total de bescanvi (m²)	33,38	
q (J/s)	841,9	
	Aigua freda	Aigua calenta
Temperatura entrada/sortida (°C)	7/12	40/35
m (kg/h)	108,6	144,8
v (m/s)	1,54	2,05

Taula 11.1.4.b.. Càlcul dels requeriments per al bescanvi de calor.

Les dimensions dels serpentins es mostren a la taula següent:

U (W/m ² °C)	200	
	Aigua freda	Aigua calenta
Àrea (m ²)	0,206	0,341
Alçada (h _{serpentí}) (m)	1,53	2,04
Amplada (w _{serpentí}) (m)	0,75	0,75
Distància entre tubs (D _{entre tubs}) (m)	0,3	0,25
Diàmetre de tub (D _{tub}) (mm)	5	5
Nombre de voltes	6	9

Taula 11.1.4.c. Dimensions del serpentí.

- **Càlcul de l'aïllant**

Encara que els tancs disposin de sistema de bescanvi de calor per mantenir-los a una temperatura de 25°C, també es posa un aïllant de **10mm** considerant que el revestiment exterior és xapa pintada i que l'aïllant és *manta spindex 322-G-70*.

- **Càlcul del venteig**

El procediment de càlcul és el mateix que en el cas del fenol, en aquest cas el percentatge d'ocupació és d'un 77,10% i la superfície humida és 18,16m², per tant, mirant a la **taula 11.1.1.c.** es troba un cabal d'aire necessari per al venteig de **5724 m³/h**.

11.1.5. Disseny funcional dels tancs d'emmagatzematge d'èter isopropílic

- **Càlcul del nombre de tancs**

En aquest cas, l'èter utilitzat per l'extracció és recuperat totalment per la columna de destil·lació que va després, per tant, en teoria no seria necessari cap tanc d'emmagatzematge d'èter. Tot i així, es calcula la quantitat necessària per cada cicle d'extracció per si de cas hi hagués algun problema i així tenir de reserva aquesta quantitat.

El cabal necessari és de 9700 kg/h, i si es suposa que el cicle dura dues hores (comptant extracció i destil·lació) el volum requerit de líquid és de $27,71\text{m}^3$. Partint d'unes dimensions del tanc suposades, es calcula el nombre de tancs necessaris seguint el mateix procediment que els apartats anteriors. A la **taula 11.1.5.a.** es mostra un resum dels resultats obtinguts:

$D_{\text{tanc}} \text{ (m)}$	$h_{\text{líquid}} \text{ (m)}$	$h_{\text{tanc}} \text{ (m)}$	$V_{\text{líquid}} \text{ (m}^3\text{)}$	$V_{\text{tanc}} \text{ (m}^3\text{)}$	Nº tancs
2,5	2,8	3,5	17,17	13,86	$1,6 \approx 2$

Taula 11.1.5.a. Dimensions del tanc d'emmagatzematge èter

- **Càlcul de la pressió de disseny:** Es segueix el mateix procediment que en els casos anteriors, tot sabent que la densitat de l'èter és de 700 kg/m^3 s'obté una pressió de disseny de **1,45 bar**.
- **Càlcul del gruix de la paret del tanc:** S'ha seguit el mateix procediment que el fenol, i es troba un gruix (suposant 1mm de tolerància de corrosió) de 2,29mm, que degut a que es té un diàmetre de tanc de 2,5m, el mínim que s'ha de tenir és de **9mm**, per tant es tria aquest gruix.
- **Càlcul del gruix inferior pla:** Es segueix el mateix procediment que en el cas del fenol, s'obté un valor de 7,5mm, el qual arrodonint es queda un gruix típic de **8mm**.
- **Càlcul del gruix superior torisfèric:** El procediment de càlcul és el mateix, i s'ha obtingut un gruix de 2,89mm; que s'aproxima a **3mm**.
- **Pes total de l'equip buit:** El procediment és el mateix, i els resultats són els següents:

$$P_{\text{total}} = P_{\text{cilindre}} + P_{\text{inferior pla}} + P_{\text{torisfèric}} = 874,74 + 315,33 + 73,26 = \mathbf{1263,32\text{kg}}$$

- **Pes de l'aparell i el seu contingut en condicions de prova (amb aigua):** Es segueix el mateix mètode del fenol, i els resultats són:

$$P_{\text{equip, aigua}} = P_{\text{equip}} + V_{\text{aigua}} \cdot \rho_{\text{aigua}} = \mathbf{15120,47\text{kg}}$$

- **Pes de l'aparell i el seu contingut:** Es segueix el mateix mètode del fenol, i els resultats són:

$$P_{\text{equip,èter}} = P_{\text{equip}} + V_{\text{èter}} \cdot \rho_{\text{èter}} = \mathbf{10963,32\text{kg}}$$

En aquest cas, com que la densitat de l'èter és menor que la de l'aigua si que s'ha de tenir en compte el pes de l'equip amb aigua, ja que aquest és major que el pes de l'equip en operació.

- **Càlcul del venteig**

El procediment de càlcul és el mateix que en el cas del fenol, en aquest cas el percentatge d'ocupació és d'un 77,12% i la superfície humida és $24,22\text{m}^2$, per tant, mirant a la **taula 11.1.1.c.** es troba un cabal d'aire necessari per al venteig de **$6978 \text{ m}^3/\text{h}$** .

11.1.6. Disseny funcional dels les cubetes de retenció

- **Fenol**

Aquest reactiu és un líquid tòxic i combustible, i mirant la norma *MIE-APQ-001* s'ha vist que es tracta d'un producte de la classe C (punt d'inflamació entre 55 i 100°C, el qual és de 79°C).

Al ser combustible ha d'estar separat dels líquids inflamables i tampoc pot estar en la mateixa cubeta que els productes corrosius, per tant, se n'ha de dissenyar una per només aquest producte.

En tot moment es segueix la norma esmentada anteriorment, la qual estableix que la capacitat de la cubeta pot estar referida segons:

- El 100% de la capacitat del recipient major.
- El 10% de la capacitat global de tots els recipients.

Per a saber quina de les dues referències s'escull, es calcula l'àrea major:

$$\text{a) } C_{\text{cubeta}} = V_{\text{líquid}} = 17,18\text{m}^3$$

Com que tots els tancs tenen la mateixa capacitat, el volum de líquid del tanc major és el volum de qualsevol dels 3 tancs.

$$\text{b) } C_{\text{cubeta}} = 10\%V_{\text{total}} = 0,1 \cdot 51,54 = 5,15\text{m}^3$$

S'observa que el volum a) és major que el b), per tant, la cubeta haurà de tenir una capacitat mínima de **17,18m³**.

A continuació es calcula l'amplada (A) i la llargada de la cubeta (L), la qual no pot contenir més de dues files de tancs i la qual la distància mínima entre aquesta i la paret del tanc ha de ser 1 metre com també la distància mínima entre recipients ha de ser d'1,5 metres. També s'ha de tenir en compte que cada tanc estarà sobre un altell, el qual li sobrarà una distància de 15cm per banda respecte la paret del reactor. Per tant, les dimensions de l'altell són:

Alçada (h) (m)	0,3
Marge tanc-altell (M) (m)	0,15
Base altell (B) (m)	2,8
Amplada altell (A) (m)	2,8
Volum altell (V) (m)	2,352

Taula 11.1.6.a.. Dimensions de l'altell

On:

$$B = D_{\text{tanc}} + 2 \cdot M \quad ; \quad A = D_{\text{tanc}} + 2 \cdot M \quad ; \quad V = B \cdot A \cdot h$$

Per tant, per saber les dimensions de la cubeta s'han de tenir en compte les dimensions dels altells i que es necessiten 3 tancs on aquests es disposaran en fila:

$$A_{\text{cubeta}} = 2 \cdot \text{Dist}_{\text{cubeta-tanc}} + A = 2 \cdot 1 + 2,8 = \mathbf{4,8m}$$

$$L_{\text{cubeta}} = 2 \cdot \text{Dist}_{\text{cubeta-tanc}} + 2 \cdot \text{Dist}_{\text{tanc-tanc}} + 3 \cdot A = 2 \cdot 1 + 2 \cdot 1,5 + 3 \cdot 2,8 = \mathbf{13,4m}$$

Suposant que la cubeta té una alçada de 0,5m (h_{cubeta}), es calcula el volum d'aquesta:

$$V_{\text{cubeta}} = A_{\text{cubeta}} \cdot L_{\text{cubeta}} \cdot h_{\text{cubeta}} = \mathbf{32,16m^3}$$

Per tenir una idea de com serà la cubeta, a la **figura 11.1.6.a.** es mostren les mides i la distribució dels tancs de fenol:

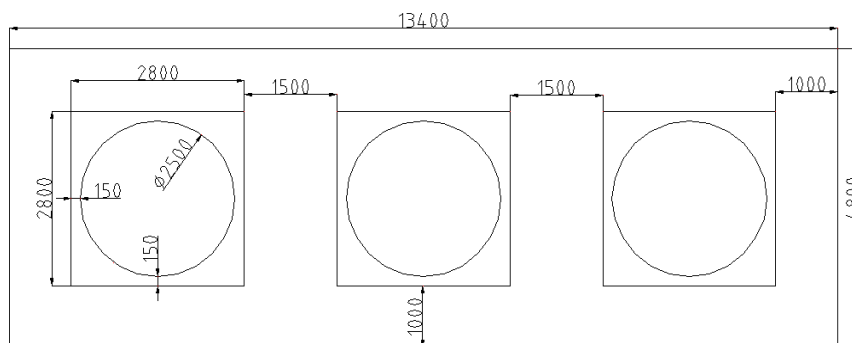


Figura 11.1.6.a. Cubeta de fenol (les mides són amb mm).

Una vegada es tenen les mides i el volum de la cubeta requerit per la normativa, s'ha de mirar si descomptant el volum ocupat pels tancs, el volum útil serà el suficient. Suposant que només hi ha el trencament d'un tanc, el volum ocupat per la cubeta, o el que és el mateix que el volum que no pot retenir el líquid d'aquest tanc és: el volum dels tres altells més el volum de la part del cilindre que ocupa la cubeta de dos tancs (ja que l'altre estarà trencat). O sigui:

$$V_{\text{ocupat}} = 3 \cdot V_{\text{altell}} + 2 \cdot V_{\text{part del tanc}} = 3 \cdot V_{\text{altell}} + 2 \cdot \left(\frac{\pi}{4} D_{\text{tanc}}^2 \cdot h_{\text{tanc-cubeta}} \right) = 9,02 \text{m}^3 \quad \text{on,}$$

$$h_{\text{tanc-cubeta}} = h_{\text{cubeta}} - h_{\text{altell}} = 0,2 \text{m}$$

Per tant, el volum útil és la resta del volum de la cubeta menys el volum ocupat:

$$V_{\text{útil}} = V_{\text{cubeta}} - V_{\text{ocupat}} = 23,14 \text{m}^3$$

Aquest volum és el que s'ha de comparar amb la capacitat mínima de la cubeta esmentada anteriorment, la qual és de **17,18m³** i es veu que amb aquestes dimensions serà suficient.

- **Àcid nítric**

Aquest reactiu s'ha de separar dels altres ja que és un producte corrosiu, per tant, la norma que s'ha seguit per al disseny de les cubetes de retenció és la *MIE-APQ-006*.

El procediment és el mateix, la única cosa que varia és que la distància entre tancs és d'un metre enlloc dels 1,5m per als productes combustibles.

A la **taula 11.1.6.b.** es mostren els resultats obtinguts en el càlcul de la capacitat de la cubeta:

100% V _{líquid} del tanc major	10% (Nºtancs*V _{líquid,tanc})
17,18m ³	5,15m ³

Taula 11.1.6.b.. Capacitat de la cubeta.

Com que s'observa que el volum major és el que fa referència al 100% del volum del líquid d'un tanc, es diu que la capacitat mínima que ha de tenir la cubeta és de **17,18m³**.

Degut a que el diàmetre dels tancs és el mateix que en el cas del fenol, les dimensions de l'altell són les mateixes que mostra la figura

El càlcul de les dimensions de la cubeta s'ha realitzat de la mateixa manera que en el cas del fenol, també considerant que es tenen 3 tancs en fila, els resultats són els següents:

$A_{\text{cubeta}} \text{ (m)}$	$L_{\text{cubeta}} \text{ (m)}$	$h_{\text{cubeta}} \text{ (m)}$	$V_{\text{cubeta}} \text{ (m}^3\text{)}$
4,8	12,4	0,5	29,76

Taula 11.1.6.c.. Dimensions de la cubeta d'àcid nítric.

La **figura 11.1.6.b.** mostra d'una forma més visual com és la cubeta d'àcid nítric:

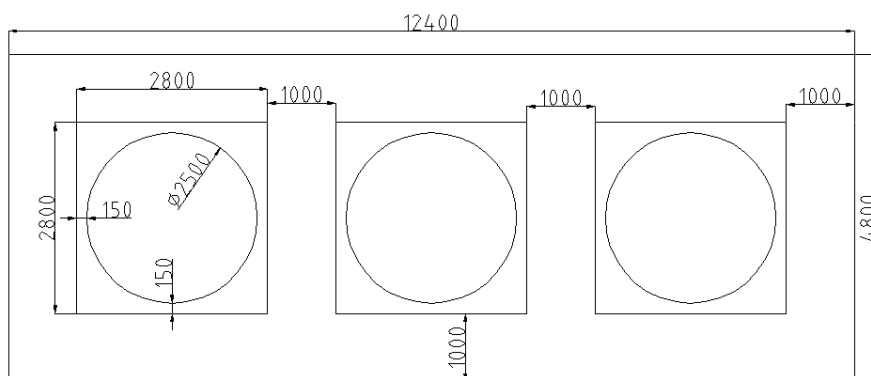


Figura 11.1.6.b. Cubeta d'àcid nítric (les mides són amb mm).

Com que el càlcul del volum ocupat i útil de la cubeta és el mateix que s'ha fet en l'apartat anterior, es mostra la **taula 11.1.6.c.** amb els resultats obtinguts:

$V_{\text{ocupat}} \text{ (m}^3\text{)}$	$V_{\text{útil}} \text{ (m}^3\text{)}$	Capacitat requerida (m ³)
9,02	20,74	17,18

Taula 11.1.6.d.. Comprovació de les dimensions de la cubeta.

Tal i com es pot observar, amb les dimensions establertes s'obté un volum útil que ja és suficient per a la capacitat requerida.

- Inflamables**

Degut a que els reactius restants que són: l'èter, àcid acètic glacial i anhidre acètic tenen una característica en comú, la qual és que són inflamables, aquests tres es poden agrupar dins la mateixa cubeta. En aquest cas s'ha seguit la normativa *MIE-APQ-001* la qual també fa referència a l'emmagatzematge de productes inflamables.

El nombre total de tancs a emmagatzemar són 6, dels quals 2 són d'anhidre acètic, 2 d'àcid acètic glacial i dos d'èter. Aquí s'ha de tenir en compte que aquests no poden estar distribuïts en més de dues files, per tant, s'escull que cada fila contingui un tanc de cada tipus.

La **taula 11.1.6.e.** mostra les dimensions de cada tanc:

	Anhidre acètic	Àcid acètic glacial	Èter
$D_{\text{tanc}} \text{ (m)}$	2,5	2,5	2,5
$h_{\text{tanc}} \text{ (m)}$	5	3	3,5
$V_{\text{tanc}} \text{ (m}^3\text{)}$	24,54	14,73	17,18
$V_{\text{líquid}} \text{ (m}^3\text{)}$	21,93	11,35	13,86
$N^{\circ}\text{tancs}$	2	2	2

Taula 11.1.6.e. Dimensions dels tancs.

El procediment de càlcul de la capacitat de la cubeta és el mateix, a la **taula 11.1.6.f.** es mostren els resultats obtinguts:

100% $V_{\text{líquid}}$ del tanc major	10% ($N^{\circ}\text{tancs} \cdot V_{\text{líquid,tanc}}$)
22,09m ³	8,54m ³

Taula 11.1.6.f. Capacitat de la cubeta.

Com que s'observa que el volum major és el que fa referència al 100% del volum del líquid d'un tanc, es diu que la capacitat mínima que ha de tenir la cubeta és de **22,09m³**.

Degut a que el diàmetre dels tancs és el mateix que en el cas del fenol, les dimensions de l'altell són les mateixes que mostra la **taula 11.1.6.a.**

El càlcul de les dimensions de la cubeta s'ha realitzat de la mateixa manera que en el cas del fenol, però en aquest cas considerant que es tenen les dues files distribuïdes com s'ha explicat anteriorment. Els resultats són els següents:

$A_{\text{cubeta}} \text{ (m)}$	$L_{\text{cubeta}} \text{ (m)}$	$h_{\text{cubeta}} \text{ (m)}$	$V_{\text{cubeta}} \text{ (m}^3\text{)}$
9,1	13,4	0,5	60,97

Taula 11.1.6.g. Dimensions de la cubeta d'inflamables.

La **figura 11.1.6.c.** mostra d'una forma més visual com és la cubeta d'inflamables:

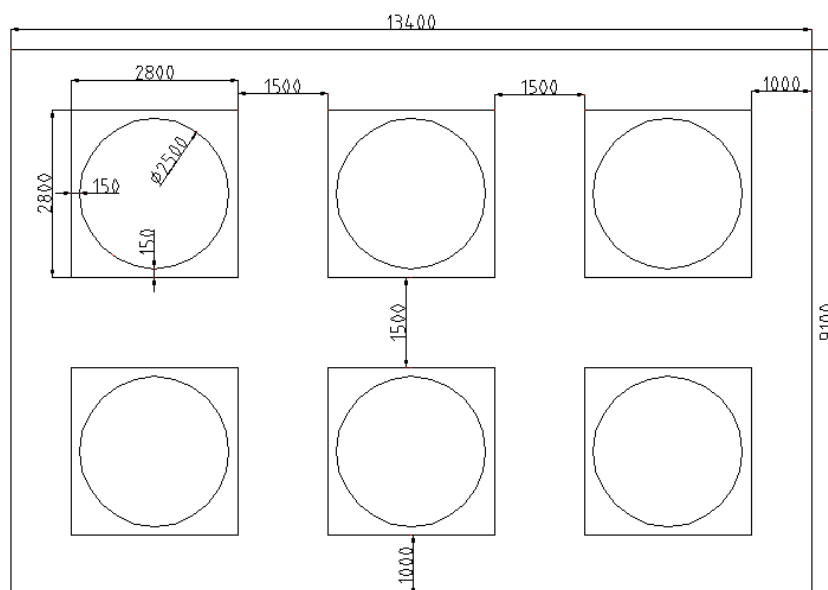


Figura 11.1.6.c.. Cubeta d'inflamables (les mides són amb mm).

El càlcul del volum ocupat i útil de la cubeta és el mateix que s'ha fet en l'apartat anterior, però variant el nombre de tancs:

$$V_{\text{ocupat}} = 5 \cdot V_{\text{altell}} + 4 \cdot V_{\text{part del tanc}} = 5 \cdot V_{\text{altell}} + 4 \cdot \left(\frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{tanc}}^2 \cdot h_{\text{tanc-cubeta}} \right) = 15,69 \text{ m}^3$$

A la **taula 11.1.6.h.** amb els resultats obtinguts:

$V_{\text{ocupat}} \text{ (m}^3\text{)}$	$V_{\text{útil}} \text{ (m}^3\text{)}$	Capacitat requerida (m ³)
15,69	45,28	22,09

Taula 11.1.6.h. Comprovació de les dimensions de la cubeta.

Tal i com es pot observar, amb les dimensions establertes s'obté un volum útil que ja és suficient per a la capacitat requerida.

11.2. DISSENY DE TANCS DE MESCLA I TANCS DE DISSOLUCIÓ

11.2.1. Disseny del tanc de dissolució d'àcid nítric (M-301a)

Aquest tanc és necessari per a dissoldre l'àcid nítric comprat amb una concentració del 70% amb aigua de servei per tal d'assolir una concentració del 15%. Per a dur a terme la reacció és imprescindible utilitzar nítric amb aquesta concentració.

Per a dissenyar aquest tanc s'ha partit de la quantitat d'àcid nítric diluït que necessita cada reactor (n'hi ha 3 i cadascun difereix dels altres en dues hores d'operació). En aquest tanc entra a més una recirculació d'àcid nítric provinent de l'evaporador (E-401a) que entra a una concentració aproximadament del 15 %. Per tant, per aconseguir aquest percentatge de nítric s'han tingut en compte les dos entrades de nítric i les seves concentracions i cabals, diluint amb l'aigua necessària. El disseny s'ha realitzat tal i com s'explica pel M-301b.

11.2.2. Disseny del tanc de mescla de CT-401a i sortida cues C-401a: (M-401a)

- **Disseny funcional**

La funció d'aquest tanc és mesclar el corrent de sòlids de sortida de la centrífuga (CT-401a) amb el corrent de cues de la columna de destil·lació d'aigua i àcid nítric (C-401a). Així doncs en aquest, es barrejaran l'àcid nítric i aigua que impregnen el sòlid que surt de la centrífuga, el paranitrofenol, l'ortonitrofenol, el dinitrofenol, tars de sortida de la centrífuga amb els components que surten per cues de la columna anterior (fenol, paranitrofenol, ortonitrofenol, dinitrofenol, diazo, aigua i àcid nítric). Tota aquesta mescla serà portada al següent equip C-402a (columna d'arrossegament amb vapor).

- **Dimensionament**

Per poder assegurar una mescla homogènia del corrent de sòlids i el corrent de sortida de cues de la columna, s'ha fixat un temps de residència superior al temps de mescla. Bibliogràficament s'ha trobat que aquest temps ha de ser com a mínim d'un ordre de magnitud superior com s'indica a Hartmann, H. Et al, 2005).

Aquest temps de mescla s'ha obtingut desenvolupant l'equació adimensional $Np^{1/3} \cdot Re = \frac{5,2}{Fo}$

(Paul, E. L. Et al, 2002) i s'ha arribat a l'equació:

$$\theta = \frac{5,2 \cdot D^2 \cdot \rho^{1/3}}{P^{1/3}}$$

On:

- Np és el nombre de potència = $\frac{P}{d^5 \cdot N^3 \cdot \rho}$
- Re és el nombre de Reynolds = $\frac{d^2 \cdot N \cdot \rho}{\mu}$
- Fo és el nombre de Fourier = $\frac{\rho \cdot D^2}{\mu \cdot \theta}$
- P és la potència de l'agitador (W)
- d és el diàmetre de l'agitador (m)
- N és la velocitat de l'agitador (rps)
- ρ és la densitat del fluid (kg/m³)
- μ és la viscositat del fluid (kg/(m·s))
- D és el diàmetre del tanc (m)
- θ és el temps de mescla (s)

Inicialment, s'ha suposat un volum del tanc i s'ha calculat el temps de residència tenint en compte el volum suposat i el cabal volumètric. Després s'ha calculat el diàmetre del tanc, fixant que l'alçada del tanc és 1,5 vegades el seu diàmetre, i seguidament la potència d'agitació necessària.

Finalment, amb l'equació deduïda s'ha determinat el temps de mescla i s'ha comprovat que el temps de residència era com a mínim 10 vegades superior a aquest.

$$V_{suposat} \Rightarrow \tau = \frac{V_{suposat}}{Cabal} \Rightarrow D = \left(\frac{V_{suposat} \cdot 4}{1,5 \cdot \pi} \right)^{1/3} \Rightarrow P = 100 \cdot V \Rightarrow \theta \Rightarrow 10 \cdot \theta \leq \tau ?$$

Finalment, s'ha fixat un temps de residència de 14,3 minuts, sent aquests suficients per assegurar una completa mescla homogènia. El volum d'aquest és de 480 litres (sobredimensionant un 15%) tenint en compte el temps de residència fixat i el cabal d'entrada. Aquest tanc de mescla com els altres de la planta és de forma cilíndrica amb capçals i fons torisfèrics.

S'ha escollit com a material AISI-304 i el gruix de les parets torisfèrica i cilíndrica és de 3 mm.

- **Agitació**

També consta d'un agitador del tipus turbina de sis pales que treballa a una potència de 800 W i amb una velocitat d'agitació de 476,42 rpm. La potència s'ha calculat en funció del tipus de mescla i del volum calculat a partir del temps de residència fixat (**taula 11.2.2.a**).

Table 10.14. Power requirements — baffled agitated tanks

Agitation	Applications	Power, kW/m ³
Mild	Blending, mixing	0.04–0.10
	Homogeneous reactions	0.01–0.03
Medium	Heat transfer	0.03–1.0
	Liquid-liquid mixing	1.0–1.5
Severe	Slurry suspension	1.5–2.0
	Gas absorption,	1.5–2.0
	Emulsions	1.5–2.0
Violent	Fine slurry suspension	>2.0

Taula 11.2.2.a. Requeriments de potència en tancs agitats en funció del volum i el tipus d'agitació i mescla

- **Balanç d'energia i disseny de la mitja canya**

A més, aquest tanc consta d'una camisa en forma de mitja canya la finalitat de la qual és escalfar la mescla fins a una temperatura de 90 °C per a l'entrada a la columna C-402a . Per als càlculs d'aquesta s'ha tingut en compte els cabals màssics d'entrada provinents de la centrífuga CT-401a i el corrent líquid de sortida del reboiler de la columna C-401a i les seves temperatures, sent aquestes de 20 i 120 °C, respectivament.

El calor que cal aportar al sistema es calcula:

$$Q = m \cdot C_p \cdot \Delta T$$

On:

Q és el que calor que cal aportar (J/s), sent aquest la resta del calor que es vol aconseguir aportar menys el calor després per l'agitació. El calor després en l'agitació es calcula com

$$Q_{\text{agitació}} = 0,92 \cdot P$$

P és la potència d'agitació (W)

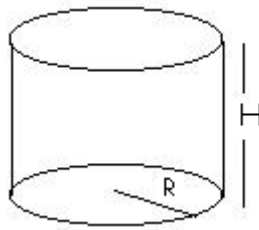
m és el cabal de la mescla (mol/s)

C_p és el calor específic de la mescla (J/(mol·°K), sent aquest de 91,83 J/(mol·°K).

ΔT és l'increment de temperatura que es requereix:

$$\Delta T = 90 - 74,5^\circ\text{C}$$

Sent els 74,5 °C la temperatura que assoleix la mescla pel simple fet de mesclar-se el corrent a 20 °C i el corrent a 120 °C.



Inicialment es calcula l'àrea total disponible pel bescanvi de calor, sent aquesta l'àrea total de la part cilíndrica:

$$A_{\text{total màxima}} = A_{\text{lateral cilindre}} = 2 \cdot \pi \cdot H \cdot R$$

S'ha decidit utilitzar oli tèrmic del que es disposa a la planta entrant a la camisa a 100 °C i retornant-se a 85 °C a l'àrea 900. Seguidament es calcula el cabal màssic necessari:

$$m = \frac{Q}{C_{p_{\text{olitàrmic}}} \cdot (T_{\text{sortidaolitàrmic}} - T_{\text{entradaolitàrmic}})}$$

On:

- $C_{p_{\text{oli tèrmic}}}$ en aquest rang de temperatures es pot considerar constant i igual a 124,4 J/(kg·°C) i tenint en compte que la densitat és de 820 kg/m³ es pot saber el cabal volumètric (m³/s).
- Q és el calor total a aportar (J/s) i m el cabal màssic d'oli tèrmic necessari (kg/s).

Es calcula l'àrea imprescindible de mitja canya tenint en compte que la velocitat de circulació de líquids per canonades ha d'estar entre 1 i 3 m/s, fixant una velocitat de circulació de 1 m/s.

$$A_{\text{mitjacanya}} = \frac{m / \rho_{\text{olitàrmic}}}{v_{\text{circulaci fluid}}}$$

$$D_{\text{mitjacanya}} = \sqrt{\frac{2 \cdot 4 \cdot A_{\text{mitjacanya}}}{\pi}}$$

Finalment, es calcula l'àrea total de transmissió de calor, fixant el valor del coeficient global de transmissió de calor de 350 W/(m²·°C).

$$A = \frac{Q}{U \cdot \left(T_{\text{mescla}} - \left(\frac{T_{\text{Eoli}} - T_{\text{Soli}}}{2} \right) \right)}$$

D'aquesta manera s'obtenen la següent àrea de bescanvi i el percentatge que aquesta representa respecte el total de l'àrea disponible:

Calor aportar Q (J/s)	1183,54885
C_poli (J/kg°C)	124,401914
T_{oli} sortida (°C)	85
T_{oli} entrada (°C)	100
Cabal màssic m (kg/s)	0,63426079
Densitat oli (kg/m³)	820
Cabal volumètric (m³/s)	0,00077349
v circulació fluid (m/s)	1
Àrea mitja canya (m²)	0,00077349
Diàmetre mitja canya (m)	0,044381

Taula 11.2.2.b. Disseny mitja canya M-401a

11.2.3. Disseny del tanc de dissolució de p-nitrofenol en àcid acètic (M-301b)

Pel disseny del tanc de dissolució per a dissoldre el p-nitrofenol en àcid acètic glacial (98%) per introduir-lo al reactor. S'ha establert que tindria forma cilíndrica amb capçal i fons toricsfèrics.

La proporció de PNP que es dissolt en àcid acètic és del 51 % en pes i ve especificada per la patent 5,648,535 per la producció de paracetamol. En la **taula 11.2.3.a** s'especifiquen els cabals volumètrics d'entrada al mesclador de cada un dels components.

Component	Cabal (m³/h)
PNP	0,545
Àcid acètic glacial (98%)	1,50

Taula 11.2.3.a Cabals entrada al mesclador M-301b

Per poder assegurar la completa dissolució del p-nitrofenol en àcid acètic glacial s'ha fixat un temps de residència superior al temps de mescla (com a mínim un ordre de magnitud superior com s'indica a Hartmann, H. Et al, 2005). Aquest procés iteratiu s'ha realitzat com en el disseny anterior del tanc de mescla M-401a, suposant inicialment un volum i comprovant que el temps de mescla sigui suficient.

S'ha decidit que la potència de l'agitador serà de 45 W per m³ de tanc, ja que el p-nitrofenol és dissolt molt fàcilment en l'àcid acètic, per aquesta raó no necessitem una elevada potència d'agitació, tal i com es pot observar en la **taula 11.2.2**.

En la següent taula es troba el disseny que s'ha donat per satisfactori:

Volum tanc (litres)	738
Alçada (m)	1,3
Diàmetre (m)	0,85
Temps de mescla (s)	12,6
Temps de residència (s)	1295

Taula 11.2.3.b Característiques del mesclador M-301b

Com es pot apreciar a la taula anterior, per assegurar una bona homogeneïtzació, el temps de residència del mesclador es aproximadament 100 vegades més gran que el temps de mescla.

L'agitador del que disposarà el tanc és una turbina de quatre pales planes disposat al centre d'aquest. La turbina gira a 90 rpm (1,5 rps) i les seves dimensions són:

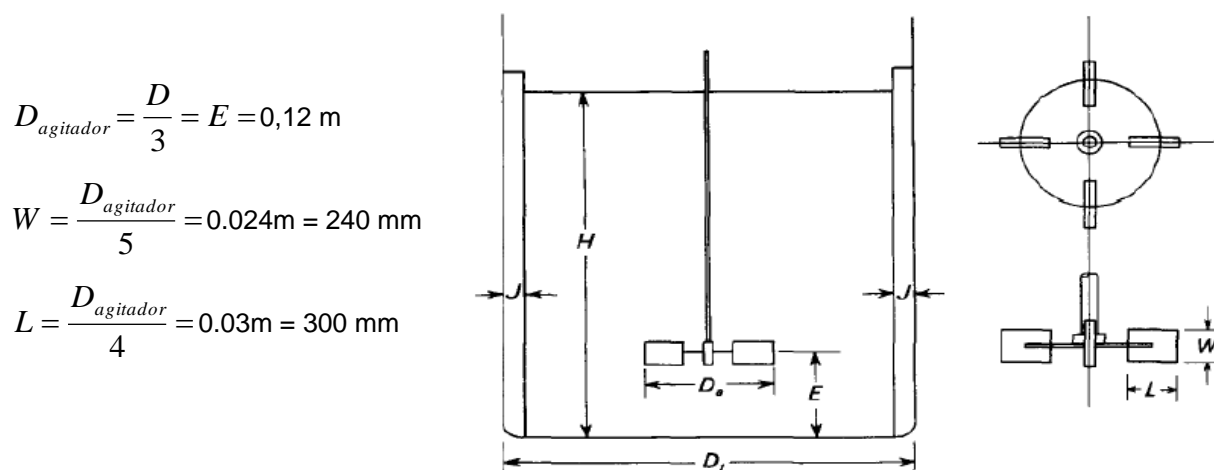


Figura 11.2.3. Mides del mesclador

Pel disseny mecànic s'ha realitzat el procediment ASME descrit amb detall en el disseny dels tancs d'emmagatzematge. Les especificacions del mesclador es troben a continuació.

Material utilitzat	Acer Inoxidable AISI -304
Gruix paret (mm)	2
Gruix fons torisfèric (mm)	8
Gruix capçal torisfèric (mm)	8
Pes equip buit (Kg)	92

Taula 11.2.3.c Especificacions mecàniques del mesclador M-301b

- **Balanç energètic**

El p-nitrofenol arriba al tanc de dissolució provinent de la columna (C-402a) a una temperatura de 120°C. Per altra banda, part el àcid acètic prové de la columna (C-401b) a una temperatura de 80°C.

Per determinar la temperatura d'operació del tanc de dissolució es realitza un balanç tèrmic:

$$Q_1 = m_1 \cdot C_{p1} \cdot (120 - T)$$

$$Q_2 = m_2 \cdot C_{p2} \cdot (T - 80)$$

Igualant els dos calors i aïllant T s'obté la temperatura d'operació del tanc:

m_1 = cabal molar de p-nitrofenol = 5518.044 mol/h

m_2 = cabal molar d'àcid acètic = 25006.94 mol/h

C_{p1} = capacitat calorífica p-nitrofenol = 144 J/mol · °C

C_{p1} = capacitat calorífica àcid acètic glacial (98%) = 139.7 J/mol · °C

11.2.4. Disseny del tanc (M-302b)

- **Dimensionament del tanc**

Per al disseny d'aquest tanc s'ha seguit el mateix procediment que per als tancs de mescla anteriors. De la mateixa manera, s'ha establert que tindria forma cilíndrica amb capçals i fons torisfèrics.

Aquest tanc és necessari ja que el corrent d'entrada d'aquest tanc prové del reactor R-301b que es troba a alta pressió i, tot i que, en sortir la pressió del corrent ja disminueix mitjançant la vàlvula 1"-R-P-322b no és aconsellable introduir-lo directament al següent equip (cristal·litzador CR-401b). Per això en aquest tanc se li ha fixat un temps de residència de 17,4 minuts, més de 100 vegades superior al corresponent al temps de mescla calculat amb les equacions utilitzades en els tancs de mescla.

El volum d'aquest es sobredimensiona un 20% obtenint un valor de 1,216 m³ i també es sobredimensiona un 50% la seva pressió de disseny resultant de 1,683 bar, ja que en aquest cas és un paràmetre clau. Per aquest motiu el gruix de disseny escollit 7 mm, per motius de seguretat i tenint en compte que el diàmetre és 1,011 m.

- **Agitació**

L'objectiu d'aquesta agitació és homogeneïtzar la mescla provinent del reactor per tal d'entrar al CR-401b. S'ha optat per un agitador de turbines de doble pala. El diàmetre de les turbines serà un terç del diàmetre del tanc (0,337 m), tal i com s'ha trobat bibliogràficament (Perry, 1999, entre la meitat i un terç del diàmetre del tanc).

L'amplada de la turbina és de 0,067 m, calculat segons la mateixa font bibliogràfica:

$$W = 0,2 \cdot D_{agitador}$$

La distància entre la turbina inferior i el fons del reactor (d_1) és 0,054 m i s'ha calculat:

$$d_1 = 0,16 \cdot D$$

La potència de l'agitador s'ha calculat tenint en compte la referència que es troba a la taula 2, resultant aquesta d'1,2 kW.

- **Balanç energètic**

La temperatura d'entrada al tanc és de 100 °C, però aquest disposa d'un bescanviador de calor en forma de mitja canya per disminuir la temperatura fins a 70 °C, ja que si no el salt tèrmic en el cristal·litzador CR-401b seria molt alt i no seria possible refredar fins a la temperatura desitjada (15 °C). Tot i així, no interessa disminuir més de 70 °C la temperatura ja que la solubilitat del paracetamol es veuria afectada produint-se la precipitació d'aquest en el tanc. S'ha simulat amb el *Hysis* per veure si al baixar la pressió s'evaporaria algun dels compostos que es troben a la mescla (paracetamol, àcid acètic, aigua i restes de paranitrofenol) i s'ha observat com no s'observaria evaporació de cap d'aquests compostos.

Per als càlculs de la mitja canya s'ha seguit el mateix procediment que en els càlculs realitzats en els cristal·litzadors, però en aquest cas el salt tèrmic és molt inferior i s'utilitza aigua de torre, entrant aquesta a 20 °C i sortint de l'equip a 40 °C.

S'ha fixat una velocitat de l'aigua de refrigeració de 1 m/s i una U de 350 W/(m²·°C) considerant els components que s'han de refredar, el fluid utilitzat i el tipus de bescanvi. La densitat mitjana de l'aigua en aquest rang de temperatures s'ha considerat de 1000 kg/m³ i la capacitat calorífica és 4180 J/(kg·°C)

El calor que cal retirar al sistema es calcula:

$$Q = m \cdot C_p \cdot \Delta T$$

On:

Q és el calor que cal retirar (J/s), sent aquest la suma del calor que es vol eliminar al disminuir fins a la temperatura desitjada i el calor després per l'agitació, sent aquest últim pràcticament menyspreable.

m és el cabal de la mescla (mol/s)

C_p és el calor específic de la mescla (J/(mol·°K))

ΔT = 30°K és la diferència de temperatura que es vol aconseguir, és a dir, de 100 a 70 °C.

Volum tanc (m³)	1,216
Alçada (m)	1,516
Diàmetre (m)	1,011
Temps de residència (minuts)	17,397
Q total (J/s)	46433,22
Àrea màxima de bescanvi (m²)	9,626
Àrea necessària (m²)	1,395
% Àrea utilitzada	14,508
Diàmetre mitja canya (mm)	0,0376
Diàmetre agitador (m)	0,337
Velocitat agitació (rpm)	299,193
Gruix part toriesfèrica (mm)	7
Gruix part cilíndrica (mm)	7

Taula 11.2.4. Dades M-302b

11.2.5. Disseny del tanc de dissolució de APAP (M-401b)

Per al disseny d'aquest tanc s'ha seguit el mateix procediment que per als tancs de mescla anteriors. De la mateixa manera, s'ha establert que tindria forma cilíndrica amb capçals i fons toriesfèrics.

Aquest tanc és necessari per escalfar la mescla líquida de sortida de la centrífuga (CT-402b) que conté paracetamol que no ha cristal·litzat en el CR-402b, traces de p-nitrofenol, aigua i àcid acètic. El corrent d'entrada al tanc entra a una temperatura d'uns 20 °C i es vol que la mescla es trobi a 85 °C en el tanc per a poder ser cristal·litzat seguidament.

Per tant, en aquest tanc és necessari un bescanviador de calor que s'ha decidit que sigui en forma de mitja canya utilitzant oli tèrmic de servei del que es disposa a la planta. Aquest oli entrarà a la camisa a 100 °C i en sortirà a 85 °C retornant aquest a la caldera de fluid tèrmic.

Components	Cabals màssics (kg/h)
Paracetamol	62,80529691
Aigua	128,545
Àcid acètic	70,115
Paranitrofenol	0,4035

Taula 11.2.5.a Components i cabals màssics d'entrada i sortida

Per als càlculs de la mitja canya s'ha seguit el mateix procediment que en els càlculs realitzats en els cristal·litzadors, amb la diferència que la funció en aquest tanc és escalfar i en els cristal·litzadors és refredar el contingut de l'equip.

S'ha fixat una velocitat d'oli tèrmic de 2 m/s i una U de 300 W/(m²·°C) considerant els components que s'han de refredar, el fluid utilitzat i el tipus de bescanvi. La densitat de l'oli utilitzat és de 820 kg/m³ i la Cp de l'oli és 124,4 J/(kg·°C)

El calor que cal aportar al sistema es calcula:

$$Q = m \cdot C_p \cdot \Delta T$$

On:

Q és el que calor que cal aportar (J/s)

m és el cabal de la mescla (mol/s)

Cp és el calor específic de la mescla (J/(mol·°K))

ΔT = 65°K és l'increment de temperatura que es vol aconseguir.

Aquest tanc de dissolució també consta d'un agitador en forma de turbina de sis pales, les dimensions del qual s'han calculat com s'ha explicat anteriorment.

Volum tanc (litres)	49,98
Alçada (m)	0,523
Diàmetre (m)	0,349
Temps de residència (minuts)	10,345
Q total (J/s)	13091,17
Àrea màxima de bescanvi (m²)	1,146
Àrea necessària (m²)	0,563
% Àrea utilitzada	49,114
Diàmetre mitja canya (mm)	104
Diàmetre agitador (m)	0,116
Velocitat agitació (rpm)	616,62
Gruix part toriesfèrica (mm)	3
Gruix part cilíndrica (mm)	3

Taula 11.2.5.b Dades M-401b

11.3. DISSENY DELS REACTORS

11.3.1. Disseny del reactor de producció de p-nitrofenol (R-301/303a)

- Càlcul de les dimensions del reactor

El volum del reactor s'ha determinat a partir de les quantitats inicials de reactius requerides per un cicle de reacció:

Reactiu	Massa (Tn)	Densitat (kg/m ³)	Volum (m ³)
Fenol	3,98	1060	3,75
Aigua	35,37	1000	35,37
HNO ₃ 70%	11,42	0,7*pHNO ₃ +0,3*pH ₂ O=1364	8,37
Total	50,77		47,5

Taula 11.3.1.a. Quantitats requerides de reactius.

Es pot veure que es requereix un volum de 47,5m³, però es fa un sobredimensionament del 15% i s'obté que es necessiten **54,63m³**. Degut al gran volum obtingut, es decideix repartir-lo en 3 reactors d'igual volum, de manera que cadascun d'aquests serà de 18,21m³. Aquests operaran paral·lelament.

Per trobar les dimensions de cada reactor es parteix que la relació alçada/diàmetre ha d'estar entre 1 i 2. Per tant, si es fixa una alçada de 4m i el diàmetre es calcula de la següent forma:

$$V = \frac{\pi}{4} \cdot D^2 \cdot h \rightarrow D = \sqrt{V \cdot \frac{4}{\pi \cdot h}} = 2,41\text{m}$$

S'obté un diàmetre de 2,41 m sent la relació entre l'altura i aquest de 1,7. Per tant, es considera correcte. Per tal d'utilitzar mides més estàndards s'estableix un diàmetre de 2,5 m, resultant així el volum recalculat per cada un dels reactors de 19,63 m³.

A la **taula 11.3.1.b.** es mostra un resum de les dimensions del reactor:

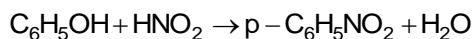
V (m3)	19,63
h (m)	4
A (m2)	4,55
D (m)	2,5

Taula 11.3.1.b. Dimensions del reactor.

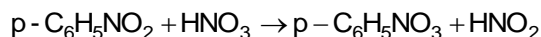
- Càlcul de les entalpies de reacció per a les dues etapes**

Degut a que en aquest reactor s'hi duen a terme dues reaccions consecutives però a l'hora simultànies, s'han de distingir dues etapes.

La primera etapa té lloc durant l'addició de les matèries primes (1 hora) i després es deixa una hora més amb les mateixes condicions favorables ($T=2^{\circ}\text{C}$) per a que aquesta es pugui acabar de dur a terme; per tant, aquesta té una durada de dues hores mantinguda a 2°C . Tal i com s'ha comentat en apartats anteriors, en aquesta etapa hi té lloc la nitrosació:



La segona etapa es diferencia de l'anterior degut a que quan s'acaben les dues hores es permet la pujada de temperatura espontània fins a 15°C . Una vegada arribada a aquesta temperatura es deixa reaccionar durant 3 hores més. En aquesta etapa hi té lloc la nitració:



Per tant, a l'hora de fer el balanç d'energia es diferenciarien les dues etapes ja que la primera es durà a terme en condicions isoterms (mantenir la temperatura a 2°C) i la segona en condicions adiabàtiques (haurà d'incrementar espontàniament la temperatura fins a 15°C i mantenir-se en aquestes condicions sense deixar que es perdi calor cap a l'exterior).

S'ha de dir que per a fer el balanç d'energia també s'ha tingut en compte que en la primera reacció es forma o-nitrosafenol, de manera que aquest també és reactiu de la segona reacció i per tant també es forma o-nitrofenol en aquesta.

Per començar es calculen les entalpies de reacció de cada etapa a partir de les entalpies de formació de cada element:

1a etapa			2a etapa	
Components	ΔH_f (kJ/mol)	$n_{\text{formats}}/n_{\text{fenol}}$ (*)	Components	ΔH_f (kJ/mol)
Fenol	-164,98		p-nitrosafenol	-188,69
HNO_2	-150		o-nitrosafenol	-183,69
p-nitrosafenol	-188,69	0,835	HNO_3	-174,1
o-nitrosafenol	-183,69	0,154	PNP(*)	-212,4
H_2O	-285,57	1	ONP(*)	-202,4
			HNO_2	-150
ΔH_{r1} (kJ/mol)	-156,41		ΔH_{r2} (kJ/mol)	-18,31

Taula 11.3.1.c. Càlcul de les entalpies de reacció de les dues etapes.

(*)PNP: p-nitrofenol, ONP: o-nitrofenol, $n_{\text{formats}}/n_{\text{fenol}}$: mols formats producte/mols fenol reaccionats

Si s'observa la primera reacció, es pot veure que és 1:1, però a l'hora de la veritat això no es compleix ja que per un mol de fenol reaccionat es forma un mol de la següent barreja: o-nitrosufenol i p-nitrosufenol; per tant, s'han de calcular els mols formats de cadascun d'ells respecte un mol de fenol a l'hora de calcular l'entalpia de reacció, la qual es calcula de la següent forma:

$$\Delta H_r = \frac{n_{\text{p-nitrosufenol}}}{n_{\text{fenol}}} \Delta H_{f(\text{p-nitrosufenol})} + \frac{n_{\text{o-nitrosufenol}}}{n_{\text{fenol}}} \Delta H_{f(\text{o-nitrosufenol})} + \frac{n_{\text{H}_2\text{O}}}{n_{\text{fenol}}} \Delta H_{f(\text{H}_2\text{O})} - \Delta H_{f(\text{fenol})} - \Delta H_{f(\text{HNO}_2)}$$

Pel que fa a la segona reacció, ja no fa falta calcular els mols formats ja que es considera que per un mol de p-nitrosufenol es forma un mol de PNP i per un mol de o-nitrosufenol es forma un mol de ONP, per tant tota la reacció és 1:1. A la pràctica també es formen d'altres compostos, com ara el 2,4-dinitrofenol i les tars, però degut al seu baix contingut respecte els altres no es tenen en compte a l'hora de fer el balanç.

- **Càlcul del calor necessari a bescanviar**

Per al càlcul del calor generat en cada reacció, s'utilitza l'expressió obtinguda del balanç d'energia per un RDTA en condicions isoterms:

$$q = \frac{-N_{k0}}{U_k} \cdot \Delta H_r \cdot x_k$$

On:

q: calor generat (kJ)

N_{k0} : mols inicials del component clau

v_k : coeficient estequiomètric del component clau

ΔH_r : entalpia de reacció (kJ/mol)

x_k : conversió respecte el component clau

S'ha de dir que tot i que la segona reacció estigui en condicions adiabàtiques, primer es fa aquest càlcul per analitzar el calor que es generaria si el sistema fos isoterm.

La **taula 11.3.1.d** en mostra els resultats obtinguts:

1a Etapa		2a Etapa	
ΔH_{r1} (kJ/mol)	-156,41	ΔH_{r2} (kJ/mol)	-18,31
N_{k0}	14089,13	N_{k0}	11587,96
v_k	-1	v_k	-1
x_k	0,984	x_k	1
q_1 (kJ)	$-2,17 \cdot 10^6$	q_2 (kJ)	$-2,12 \cdot 10^5$

Taula 11.3.1.d. Càlcul de la calor generada en cada etapa.

(*) k és el fenol en la primera etapa i el p-nitrosufenol en la segona

Aquest és el calor generat en cada reacció, però per a fer el càlcul del calor a bescanviar en la primera etapa de reacció (en la segona etapa serà nul al tractar-se en condicions adiabàtiques), s'ha de tenir en compte que durant les dues hores inicials no només es duu a terme la primera reacció, sinó que part de la segona també, encara que estigui desfavorida. Per tant, es fa una aproximació dient que el calor necessari a bescanviar en la primera etapa (Q_1) és el 70% del calor generat en la primera reacció més el 40% del calor generat en la segona:

$$Q_1 = 0,7 \cdot q_1 + 0,4 \cdot q_2 = -1,6 \cdot 10^6 \text{ kJ}$$

Si aquesta calor es reparteix en les dues hores en que té lloc la primera etapa s'obtenen **8,01·10⁵kJ/h**.

- **Dimensionament de la mitja canya**

Per a bescanviar el calor calculat anteriorment s'escull un sistema de mitja canya refrigerat amb una mescla d'aigua i glicol al 30%, ja que així es pot treballar a temperatures inferiors a 0°C, en aquest cas fins a -16°C.

Primer de tot, es calcula l'àrea total de bescanvi a partir de la següent fórmula:

$$Q_1 = U \cdot A \cdot DTML$$

On:

U: coeficient global de transmissió de calor (W/m²°C)

A: àrea total de bescanvi (m²)

$$DTML = \frac{(T_f - T_e) - (T_f - T_s)}{\ln\left(\frac{T_f - T_e}{T_f - T_s}\right)} : \text{increment de temperatura mitjana logarítmica}$$

T_f : temperatura que es vol mantenir dins del reactor

T_e : temperatura d'entrada del fluid refrigerant

T_s : temperatura de sortida del fluid refrigerant

Com a valor típic de coeficient global de transmissió de calor per a mitges canyes es mira la **taula 11-7 del Perry** on el fluid que conté la jaqueta és la salmorra (brine) i el fluid dins del tanc és una solució aquosa. Finalment s'escull el valor màxim de 850 W/m²K.

Tenint en compte que el fluid refrigerant (aigua glicolada) entra a una temperatura de -13°C i surt a -5°C, la DTML calculada és de 10,5°C. Per tant, l'àrea obtinguda és 24,95m².

Per al dimensionament de la mitja canya es parteix de valors típics de diàmetre de tubs i distància entre ells, els quals s'ha escollit de 86mm i 15mm respectivament. Per tant, amb aquests valors ja es poden calcular el nombre de tubs (voltes) necessaris:

$$N^{\circ} \text{ tubs} = \frac{A_{\text{total}}}{A_{1\text{tub}}} = \frac{A_{\text{total}}}{D_{\text{tub}} \cdot L_{\text{tub}}} = \frac{A_{\text{total}}}{D_{\text{tub}} \cdot \pi \cdot D_{\text{reactor}}} = 36,9 \approx 37$$

A_{total} : àrea total de bescanvi (m^2)

$A_{1\text{tub}}$: àrea de bescanvi d'un tub (m^2)

L_{tub} : longitud d'un tub (m)

D_{tub} : diàmetre del tub (m)

D_{reactor} : diàmetre del reactor (m)

Per comprovar si el reactor és el suficient gran per a disposar d'una mitja canya amb 37 tubs, es calcula el nombre de tubs màxim que es podrien posar:

$$N^{\circ} \text{ tubs màxim} = \frac{h_{\text{reactor}}}{D_{\text{tub}} + D_{\text{tub-tub}}} = 39,6 \approx 39$$

h_{reactor} : alçada del reactor (m)

$D_{\text{tub-tub}}$: distància entre tubs (m)

Degut a que hi podrien haver fins a 39 tubs, es corrobora que 37 tubs hi caben perfectament.

- **Càlcul del cabal de refrigerant**

El cabal de refrigerant necessari que ha de circular per la mitja canya es calcula amb la fórmula següent:

$$Q_1 = m \cdot C_p \cdot \Delta T$$

On:

m : cabal màssic de refrigerant (kg/h)

C_p : calor específic del refrigerant (kJ/kg°C); 3,726kJ/kg°C

ΔT : increment de temperatures del refrigerant (°C); 8°C

Finalment es troba que el cabal màssic de refrigerant és de 26885,9kg/h. Aquest valor permet saber el cabal volumètric pertinent, i amb aquest es calcula la velocitat de pas, la qual s'ha de comprovar que estigui entre 1 i 2,5m/s:

$$v = \frac{Q_v}{A_{\text{pas}}} = \frac{\frac{m}{\rho}}{\frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{tub}}^2} = 2,43 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

On:

Q_v : cabal volumètric (m^3/s)

A_{pas} : àrea de pas d'un tub (m^2)

ρ : densitat del refrigerant (kg/m^3); $1057kg/m^3$

Es pot observar que la velocitat està dins dels límits establerts. Per tant es dona el disseny com a bo.

- **Càlcul de la temperatura al reactor durant la segona etapa**

Un altre aspecte a tenir en compte és que s'ha de comprovar per veure si s'ha fet bé el balanç d'energia és la temperatura a la que està el reactor durant la segona etapa. Tal i com s'ha comentat anteriorment quan s'acaben les dues hores la temperatura ha de pujar sola fins als $15^\circ C$ i mantenir-se en aquestes condicions durant 3 hores, per tant, a partir d'aquest moment deixa de circular refrigerant ja que el calor bescanviat ha de ser nul.

Com que en aquesta part s'ha de tractar com si el reactor fos adiabàtic, l'equació pertinent al balanç d'energia és la següent:

$$\sum N_{jo} \cdot C_{pj} \cdot \Delta T - \frac{N_{ko}}{V_k} \cdot \Delta H \cdot x_k = q = 0$$

N_{jo} : massa inicial del component j (kg)

C_{pj} : calor específic del component j ($kJ/kg^\circ C$)

Degut a que es té inicialment aproximadament un 80% d'aigua respecte tots els reactius, es considera que els altres són despreciables a l'hora de calcular el primer terme de l'equació del balanç d'energia.

El segon terme de l'equació s'ha calculat anteriorment, el qual donava un valor de $-2,12 \cdot 10^5$ kJ. Aquest valor també s'ha de corregir tal i com s'ha fet en la primera etapa considerant que el calor generat en la segona és un 30% del calor generat en la primera més un 60% del de la segona. Després, aquest s'ha de dividir en 3 hores que dura la segona etapa:

$$Q_2 = 0,3 \cdot q_1 + 0,6 \cdot q_2 = -7,78 \cdot 10^5 \text{ kJ} \xrightarrow{3 \text{ hores}} -2,59 \cdot 10^5 \frac{\text{kJ}}{\text{h}}$$

A partir de la massa inicial d'aigua ($12933,3kg$), el calor específic d'aquesta ($4,2kJ/kg^\circ C$) i la temperatura inicial ($2^\circ C$), es calcula la temperatura final a la que es trobarà la mescla, la qual és de **$16,3^\circ C$** . Amb aquest resultat ja es pot corroborar que el balanç d'energia que s'ha fet és correcte.

- **Disseny mecànic del reactor**

1) Càlcul de la pressió de disseny

Per a calcular el gruix requerit de l'equip s'utilitza el codi ASME. Tot i que aquest faci referència al càlcul d'equips a pressió, es fa una aproximació considerant que la pressió de disseny és la que exerceix la columna de líquid:

$$\Delta P_{\text{rel}} = \rho \cdot g \cdot h_{\text{liquid}} = 1089,93 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \cdot 9,81 \frac{\text{m}}{\text{s}^2} \cdot 4\text{m} = 42768,97\text{Pa} = 0,428\text{bar}$$

Aquesta és la pressió relativa, per a saber l'absoluta se li suma la pressió atmosfèrica:

$$\Delta P_{\text{abs}} = \Delta P_{\text{rel}} + P_{\text{atm}} = 0,428\text{bar} + 1,013\text{bar} = 1,44\text{bar}$$

En aquesta pressió se li aplica un sobredimensionament del 15% per assegurar-se que el sistema funcionarà correctament:

$$P_{\text{disseny}} = \Delta P_{\text{abs}} + \Delta P_{\text{abs}} \cdot \frac{15}{100} = 1,66\text{bar}$$

2) Càlcul de la temperatura de disseny

La temperatura d'operació del reactor mínima és 2°C, i la màxima 15°C, per tant, per dissenyar el reactor s'han de tenir en compte aquests valors. S'estableix que per al disseny se li sumen 15°C per sobre de la temperatura màxima d'operació, i 10°C per sota de la mínima, per tant, aquesta serà: **-12/25°C**.

3) Càlcul dels gruixos necessaris

- Cilindre

Per començar, es tria un material de construcció, el qual és acer inoxidable 304, seguidament es procedeix al càlcul, la qual la fórmula pertinent és la següent:

$$t = \frac{P \cdot D_i}{2 \cdot S \cdot E - 1,2 \cdot P} + C_1 + C_2$$

On:

t: gruix del tanc (mm)

D_i: diàmetre intern (mm)

P: pressió de disseny (bar)

S: límit elàstic; S=1650bar (per una T<50°C i material AISI 304); trobat al Coulson V.6

E: factor de soldadura (soldadura en X i radiografiat parcial); E=0,85; trobat al Coulson V.6

C₁: sobreesspessor per corrosió (mm); C₁=2mm (ja que es té nítric i aquest és corrosiu)

C₂: tolerància de fabricació (mm); C₂=0

El gruix necessari per a la paret del tanc és de 3,48mm; però mirant a la bibliografia (Coulson V.6) es troba que per diàmetres de 2,5m s'han d'utilitzar com a mínims gruixos de **9 mm**, per tant, és aquest el gruix escollit.

- Fons superior i inferior

Es considera que les dues tapes del reactor són de forma toriesfèrica, per tant, el càlcul d'aquestes serà anàleg.

S'escull que la relació L/r és de 16,67. Per tant, l'expressió corresponent per al càlcul del gruix és:

$$t = \frac{0,885 \cdot P \cdot L}{S \cdot E - 0,1 \cdot P} + C_1 + C_2$$

On:

L: diàmetre intern del reactor (mm)

C₂: en aquest cas la sobreesspessor per corrosió es considera que és 0,1·t.

El gruix del fons superior és de 3,99mm, en canvi el del fons inferior és de 5,12. Això és degut a que la pressió de disseny per al superior es considera que és una atmosfera (ja que no hi ha líquid sobre aquest que exerceixi una pressió) i en el cas de l'inferior es considera la mateixa pressió que s'ha calculat per al cilindre. Per tant, els gruixos finals són **4mm** i **5mm** per al fons superior i inferior respectivament.

4) Càlcul de l'aïllant

Degut a que la segona etapa de reacció es duu a terme en condicions adiabàtiques, per a que el calor bescanviat sigui nul s'ha de disposar d'algun sistema d'aïllament que no permeti la dispersió de calor cap a l'exterior. Per a calcular el gruix necessari, s'ha fet amb l'ajuda del programa INDUVER (obtingut a Internet a la pàgina web d'ISOVER).

Primer de tot, es posen els valors de les temperatures interiors i exteriors i després s'escull el tipus d'aïllant i revestiment exterior. Es considera que el reactor està pintat i que l'aïllant és *Manta Spintex 322-G-70*, la qual consisteix en una manta de llana de roca amb malla metàl·lica d'acer galvanitzat per la seva cara exterior. És un aïllant que s'utilitza per equips, forns, calderes, etc. Com que el reactor es troba dins de l'edifici, la temperatura de l'exterior és constant, i es considera que és 25°C. A la **Taula 11.3.1.e** es mostren els resultats:

ISOVER EQUIPOS - Espesor de aislamiento para obtener una temperatura superficial

Temperatura de fluido por el interior: 15 °C
 Temperatura en el ambiente exterior: 25 °C
 Altura de la pared: 4 m
 Lado 1: m
 Lado 2: m

Pared en...
☒ El interior ☐ El exterior Velocidad del aire m/s
 Orientación de la pared
☒ Vertical ☐ Horizontal

Temperatura en la superficie exterior revestimiento: 25 °C

Revestimiento Exterior
 Chapa pintada

Aislamiento
 MANTA SPINTEX 322-G-70

Coefficiente superficial de calor interior (hi)
☐ Suponer hi = W/(m²·K)
☒ Obviar resistencia superficial interior

Espesor Teórico: 60 mm
Recomendación Isover: 60 mm

Taula 11.3.1.e. Càlcul del gruix d'aïllant.

La temperatura superficial ha de ser la mateixa que l'exterior, ja que així s'estableix que el reactor sigui adiabàtic. S'ha obtingut un gruix de **60 mm**.

5) Càlcul de l'agitador

Aquest reactor també consta d'un agitador, i per a saber de quin tipus es tracta es necessita saber la viscositat de la mescla i el volum del reactor. Per a saber la viscositat de la mescla es fa una mitja entre la viscositat que es té inicialment i al final de la reacció.

Les taules següents mostren els valors utilitzats per al càlcul de la viscositat de la mescla:

ENTRADA (T=20°C)		
Components	Fracció massica	Viscositat (kg/m·s)
Fenol	0,080	—
HNO ₃	0,144	$1,50 \cdot 10^{-3}$
H ₂ O	0,776	$1,50 \cdot 10^{-3}$
Total	1	$1,50 \cdot 10^{-3}$

Taula 11.3.1.f. Viscositat inicial de la mescla.

SORTIDA (T=15°C)		
Components	Fracció màssica	Viscositat (kg/m·s)
Fenol	0,004	--
HNO ₃	0,089	$1,20 \cdot 10^{-3}$
H ₂ O	0,791	$1,00 \cdot 10^{-3}$
PNP	0,097	$5,00 \cdot 10^{-3}$
ONP	0,018	$5,00 \cdot 10^{-3}$
Total	0,999	$1,47 \cdot 10^{-3}$

Taula 11.3.1.g. Viscositat final de la mescla

La mitjana entre la viscositat inicial i final és de $1,49 \cdot 10^{-3}$.

Per tant, partint que es té un volum de $19,63 \text{ m}^3$ i de les viscositats calculades, a partir de la **figura 11.3.1.a.** es pot trobar el tipus d'agitador necessari:

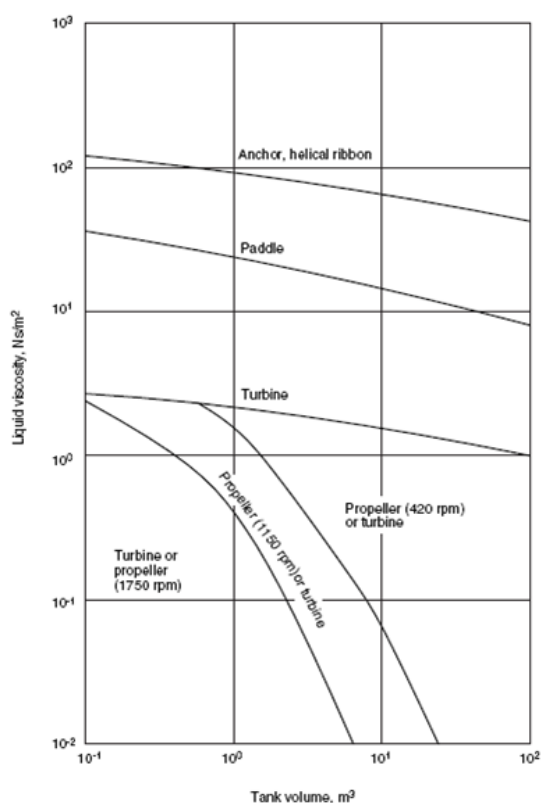


Figura 11.3.1.a. Selecció del tipus d'agitador.

Es pot observar que per la viscositat obtinguda i per al volum que té el reactor és necessari l'ús de propulsors o turbines. S'ha decidit escollir el tipus turbina.

Per a dimensionar l'agitador es busquen a la bibliografia (Perry) valors típics i es troba que el diàmetre de l'impulsor és la meitat que el diàmetre del reactor, i que la seva amplada (w_{impulsor}) és 1/5 part del diàmetre de l'impulsor, per tant:

$$d_{\text{impulsor}} = \frac{D_{\text{reactor}}}{2} = 1,25 \text{ m} \quad ; \quad w_{\text{impulsor}} = \frac{D_{\text{impulsor}}}{5} = 0,25 \text{ m}$$

Per assegurar-se que no es forma vòrtex, es decideix col·locar 4 bafles verticals amb una amplada (w_{baffle}) igual a $D_{\text{reactor}}/12$ i una distància entre aquest i la paret de $D_{\text{reactor}}/24$, per tant:

$$w_{\text{baffle}} = \frac{D_{\text{reactor}}}{12} = 0,21\text{m} \quad ; \quad \text{dist}_{\text{baffle-paret}} = \frac{D_{\text{reactor}}}{24} = 0,104\text{m}$$

A continuació s'ha de calcular la potència de l'agitador, però abans s'ha de calcular el número de potència, el qual està relacionat amb la potència:

$$N_p = \frac{P}{\rho \cdot N^3 \cdot D^5}$$

N_p : número de potència

P: potència de l'agitador (W)

ρ : densitat de la mescla (1089,9kg/m³)

N: velocitat de l'agitador (s'ha escollit que sigui 1rps)

D: diàmetre de l'impulsor (m)

Per a trobar el nombre de potència es necessita al Reynolds i la **figura 11.3.1.b.**:

$$Re = \frac{D^2 \cdot N \rho}{\mu} = 1,38 \cdot 10^6$$

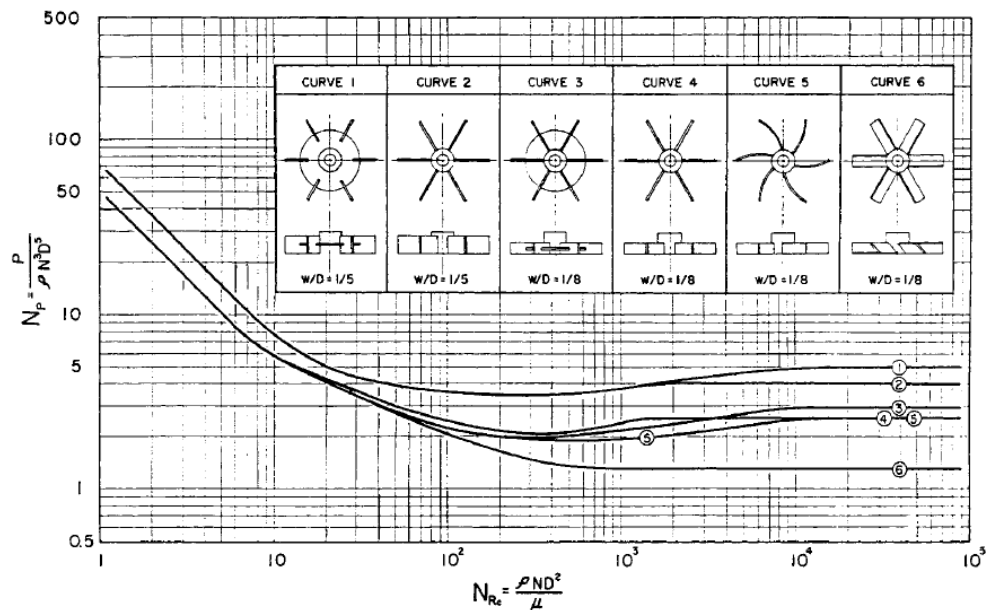


Figura 11.3.1.b. Número de potència en tancs agitats.

Com a tipus de turbina s'ha escollit la corba 1 o 2, per tant es troba que $N_p=5$. Una vegada trobat aquest nombre adimensional es calcula la potència i es troba que és 16631W. Degut a que es té una mescla bastant viscosa, es decideix posar dos impulsors, per tant la potència s'ha de multiplicar per 2, la qual queda 33262,1W.

Per a comprovar quin tipus d'agitació es té, s'ha de dividir la potència entre el volum del reactor, i queda **1,69kW/m³**. A continuació es mira la **taula 11.3.1.h.**:

Agitation	Applications	Power, kW/m ³
Mild	Blending, mixing	0.04–0.10
	Homogeneous reactions	0.01–0.03
Medium	Heat transfer	0.03–1.0
	Liquid-liquid mixing	1.0–1.5
Severe	Slurry suspension	1.5–2.0
	Gas absorption,	1.5–2.0
	Emulsions	1.5–2.0
Violent	Fine slurry suspension	>2.0

Taula 11.3.1.h. *Requeriments de potència per a tancs agitats.*

Es pot observar que per 1,69kW/m³ es necessita entre una agitació severa, per tant, es comprova que és correcte ja que aquesta agitació serveix per a 'slurry suspension', el qual es suposa que és el que tenim dins del reactor.

11.3.2. Disseny del tanc pulmó M-302a

- Càlcul de les dimensions del tanc pulmó**

Per a calcular el volum del tanc pulmó, s'ha vist que com a molt es necessitarà la capacitat per a emmagatzemar un batch i mig, ja que cada reactor descarrega cada dues hores i el tanc pulmó té un cabal de sortida per hora de la meitat de la càrrega d'un batch.

Per tant, a la taula següent es mostren els valors necessaris per al càlcul del volum d'aquest:

Components	1 Batch (kg/h)	1 Batch (m ³)	½ Batch (m ³)
Fenol	62,2	0,058	0,029
Àcid nítric pur	1488,67	0,98	0,49
Aigua	13184,33	13,19	6,59
p-Nitrofenol	1613,33	1,09	0,54
o-Nitrofenol	297	0,20	0,10
di-Nitrofenol	55,33	0,033	0,016
Diazo-oxide	65,67	0,039	0,019
Tars	80	0,047	0,024
TOTAL	16846,53	15,20	7,60

Taula 11.3.2.a. Volum del tanc pulmó

Per tant, el volum mínim necessari del tanc pulmó ha de ser de 22,8 m³, que sobredimensionant un 20% dóna 27,3m³. Llavors, establint que aquest té un diàmetre de 3m i una alçada de 4m, es troba que el volum real és de 28,27 m³.

- Disseny mecànic del reactor**

- Càlcul de la pressió de disseny**

Es segueix el mateix procediment que s'ha explicat en el cas del reactor i es troba que aquesta és de 1,60 bar.

- Càlcul dels gruixos necessaris**

Com que es segueix el mateix procediment que en cas del reactor, es mostra una taula resum amb els resultats obtinguts:

	Gruix calculat (mm)	Gruix requerit (mm)
Cilindre	3,7	12 (*)
Fons inferior torisfèric	5,6	6
Fons superior torisfèric	4,3	5

(*) Al ser el diàmetre del tanc de 3m, el mínim gruix requerit és de 12mm.

Taula 11.3.2.b.. Gruixos necessaris

3. Càlcul de l'agitador

Es segueix el mateix procediment que en el cas del reactor, però en aquest cas el tipus de turbina és *shrouded turbine impeller*. A la **taula 11.3.2.c.** es mostren els resultats obtinguts:

Diàmetre turbina (m)	1,5
Velocitat agitador (rps)	1
Mitja viscositat (kg/m·s)	$1,47 \cdot 10^{-3}$
Densitat mitja (kg/m³)	1100,2
Reynolds	$1,68 \cdot 10^6$
Amplada baffle (m)	0,25
Distància entre baffle i paret del reactor (m)	0,125
Np	3
Amplada turbina (m)	0,187
Potència agitador (W)	25063,9
Nº turbines	2
Potència total agitador (W)	50127,9
kW/m³ reactor	1,77

Taula 11.3.2.c. Característiques de l'agitador.

4. Càlcul del pes de l'equip

Es segueix el mateix procediment que en el cas dels tancs d'emmagatzematge i els resultats són els següents:

Buit (kg)	4008,1
Amb aigua (kg)	28748,1
En operació (kg)	31227,1

Taula 11.3.2.d. Pes de l'equip.

11.3.3. Disseny del reactor de producció de paracetamol: hidrogenació i acetilació

- **Disseny funcional del reactor**

La segona part del procés consisteix en la hidrogenació del p-nitrofenol per formar p-aminofenol, i l'acetilació d'aquest utilitzant anhidre acètic per la formació del producte final, el paracetamol. Aquestes dues reaccions tenen lloc en el mateix reactor que opera de manera continua a diferència del primer reactor.

- **Dimensionament del reactor**

El volum del reactor es calcula mitjançant el coneixement de paràmetres fonamentals.

- ✓ Els cabals volumètrics de reactius que entren en el reactor i que venen fixats per la producció de paracetamol en la planta i pel grau de conversió global de les dues reaccions.
- ✓ El temps de residència per dur a terme les reaccions especificat en la patent 5,648,535.

Cabal PNP (m³/h)	0,54
Cabal Àcid acètic (m³/h)	1,50
Cabal Anhidre acètic (m³/h)	0,61
Cabal hidrogen (m³/h)	15,6
Temps de residència (min)	38
Grau de conversió global	0.99

Taula 11.3.3.a. Paràmetres pel dimensionament del reactor

El cabal volumètric d'entrada al reactor es la suma de tots els cabals líquids, mes el 10% del cabal gasos (Hidrogen), ja que al introduir-se per sota el reactor i dissoldre's en el líquid, les bombolles només ocupen aproximadament un 10% del volum total del hidrogen que s'introdueix al reactor.

Cabal entrada = Cabal PNP + Cabal Àcid acètic + Cabal Anhidre acètic + 0.1·Cabal Hidrogen

$$\text{Cabal entrada} = 4.21 \text{ m}^3/\text{h}$$

Mitjançant l'expressió:

$$\tau = \frac{\text{Volum reactor}}{\text{Cabal entrada}}$$

I aïllant el volum del reactor:

$$\text{Volum reactor} = 2.67 \text{ m}^3$$

Per motius de seguretat es sobredimensiona el reactor un 25 %, a més es suma el volum que ocupa el serpentí intern, per tant el volum real és:

$$\text{Volum reactor real} = 3.53 \text{ m}^3$$

Les dimensions del reactor venen determinades per l'àrea disponible de transferència de calor, ja que el calor a bescanviar es elevat. Com s'explica detalladament en l'apartat següent, el sistema de bescanvi de calor es un serpentí de longitud 1,43 metres, per tant l'alçada del reactor fixa en 2 m.

Un cop determinada l'alçada es determina el diàmetre del reactor mitjançant l'expressió:

$$\text{Diàmetre} = \sqrt{\frac{4 \cdot \text{Volum reactor}}{\pi \cdot \text{Alçada}}}$$

$$\text{Diàmetre} = 1,5 \text{ metres}$$

- **Balanç d'energia**

Globalment les reaccions produïdes desprenen una gran quantitat de calor per tant s'ha d'instal·lar un sistema per poder bescanviar tota la calor produïda i mantenir el reactor a la temperatura d'operació 100°C.

Una part del calor generat per les reaccions s'utilitza per escalfar els reactius que entren al reactor provinents dels tancs d'emmagatzematge o del procés anterior. Per tant per calcular la quantitat de calor a bescanviar es realitza un balanç d'energia al reactor.

Expressió del balanç d'energia:

$$Q = \sum m_e \cdot C_{p_e} \cdot (T_e - T_r) - \frac{m_k}{\gamma_k} \cdot X_k \cdot \Delta H_r$$

On :

m_e = Cabals molars entrada dels reactius.

C_p = Capacitat calorífica dels reactius (Es considera constant).

T_r = Temperatura d'operació.

T_e = Temperatura entrada dels reactius.

ΔH_r = Entalpia reacció. (Es considera constant)

m_k = Cabal molar component clau.

γ_k = Coeficient estequiomètric component clau.

X_k = Grau de conversió.

Les reaccions produïdes en el reactor són: Hidrogenació, Acetilació i Hidròlisi de l'anhidre acètic. Com en el reactor es produeixen 3 reaccions consecutives el balanç energètic es calcula per cada una de les reaccions.

L'entalpia de reacció es un paràmetre que no s'ha trobat bibliogràficament ni experimentalment, per tant es calcula a partir de les entalpies de formació dels reactius i productes segons l'expressió:

$$\Delta H_r = \sum \gamma \cdot \Delta H_f \text{ productes} - \gamma \cdot \Delta H_f \text{ reactius}$$

L'entalpia es considera constant per tant encara que el reactor operi a 100°C. A la següent taula es troben les entalpies de formació dels diferents components.

Component	Entalpia formació (KJ/mol)
p-aminofenol	-190.6
p-nitrofenol	-212.4
Aigua	-285.3
Àcid acètic	-484.5
Anhidre acètic	-625
Hidrogen	0
Paracetamol	-287

Taula 11.3.3.b. Entalpies de formació

Aplicant l'anterior expressió s'obté l'entalpia de reacció per a cada una de les reaccions

$$\Delta H_{r1} = ((3 \cdot -285.3) + (1 \cdot -190.6)) - ((1 \cdot -212.4) + 0) = -589.6 \text{ KJ/mol}$$

$$\Delta H_{r2} = ((1 \cdot -287) + (1 \cdot -484.5)) - ((1 \cdot -625) + (1 \cdot -190.6)) = 43.5 \text{ KJ/mol}$$

$$\Delta H_{r3} = ((2 \cdot -484.5)) - ((1 \cdot -285.3) + (1 \cdot -625)) = -58.17 \text{ KJ/mol}$$

$$\Delta H_{r\text{global}} = -589.6 + 43.1 - 58.17 = -564.53 \text{ KJ/mol}$$

Un cop calculada l'entalpia de reacció per a cada reacció es calcula el primer terme del balanç, el qual correspon a la calor absorbida per l'escalfament dels reactius fins a la temperatura d'operació (100°C).

$$Q_{\text{abs}} = \left(5.52 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} \cdot 144 \frac{\text{KJ}}{\text{Kmol}^\circ\text{K}} \cdot 13^\circ\text{K} \right) + \left(16.55 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} \cdot 7.1 \frac{\text{KJ}}{\text{Kmol}^\circ\text{K}} \cdot 80^\circ\text{K} \right) + \left(6.132 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} \cdot 168.2 \frac{\text{KJ}}{\text{Kmol}^\circ\text{K}} \cdot 80^\circ\text{K} \right) + \left(25 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} \cdot 139.7 \frac{\text{KJ}}{\text{Kmol}^\circ\text{K}} \cdot 13^\circ\text{K} \right) = 147648.3 \text{ KJ/h}$$

Un cop calculat el primer terme es calcula el segon terme (calor generat per cada reacció):

$$Q_{\text{gen1}} = \frac{5518 \frac{\text{mol}}{\text{h}}}{-1} \cdot 0.999 \cdot -589.6 \frac{\text{KJ}}{\text{mol}} = -3031117.84 \frac{\text{KJ}}{\text{h}}$$

$$Q_{\text{gen2}} = \frac{5512 \frac{\text{mol}}{\text{h}}}{-1} \cdot 0.999 \cdot 43.5 \frac{\text{KJ}}{\text{mol}} = 26111.51 \frac{\text{KJ}}{\text{h}}$$

$$Q_{\text{gen3}} = \frac{62.6}{-1} \cdot 0.999 \cdot -58.17 \frac{\text{KJ}}{\text{mol}} = -3641.41 \frac{\text{KJ}}{\text{h}}$$

Per tant el calor total a bescanviar:

$$Q = 147648.3 \text{ KJ/h} - 3031117.84 \text{ KJ/h} + 26111.51 \text{ KJ/h} - 3641.41 \text{ KJ/h} = 2860999.5 \text{ KJ/h}$$

$$Q = 794,72 \text{ KJ/s}$$

Per poder dissipar el calor produït i mantenir el reactor a 100°C es dissenya un serpentí intern utilitzant com a fluid refrigerant aigua a 20°C provinent de la torre de refrigeració.

- **Disseny del serpentí intern**

Primerament es troba l'àrea necessària per poder dissipar el calor del reactor mitjançant la següent expressió:

$$Q = U \cdot A \cdot DTML$$

On:

U = Coeficient global de transferència de calor.

A= Area requerida per poder dissipar el calor.

DTML = Mitjana logarítmica entre la temperatura del reactor i la del fluid refrigerant.

Tenint en compte el material del serpentí és acer i la mescla de dins el reactor s'agafa un valor típic de 750 W/m² °C.

La temperatura de l'aigua a l'entrada del serpentí es de 20°C (provinent de la torre de refrigeració), i es fixa una temperatura de sortida de 40°C. S'escull 40°C ja que per a temperatures superiors hi hauria problemes per poder refrigerar l'aigua fins a 20°C en la torre i es necessitaria un altre sistema de refrigeració més potent. Per tant la DTML es calcula com:

$$DTML = \frac{(Tr - T1) - (Tr - T2)}{\ln\left(\frac{Tr - T1}{Tr - T2}\right)}$$

$$DTML = 66.52^{\circ}\text{C}$$

On:

Tr = Temperatura d'operació del reactor: 100°C

T1= Temperatura d'entrada del fluid refrigerant: 20°C

T2= Temperatura sortida fluid refrigerant: 40°C

Aïllant l'àrea de l'expressió anterior:

$$A = \frac{Q}{U \cdot DTML}$$

$$\text{Area} = 15.24 \text{ m}^2$$

Per tant per poder dissipar tot el calor produït en les reaccions necessitem com a mínim 15.24 m².

Per motius de seguretat es sobredimensiona l'àrea un 10% per tant l'àrea de bescanvi real és de **16.5 m²**.

El serpentí utilitzat esta format per acer i posseeix un diàmetre intern de 70 mm i un d'extern de 72 mm. La longitud requerida per que és complexi l'àrea requerida es de 75 metres. La distancia entre el serpentí i la paret del reactor es de 5 cm.

Amb aquestes dades es calcula el perímetre d'una volta de serpentí amb l'expressió d'una circumferència:

$$\text{Perímetre 1 volta} = 2 \cdot \pi \cdot r^2$$

$$\text{Perímetre 1 volta} = 4.4 \text{ metres.}$$

El quocient entre la longitud total del serpentí i del perímetre d'una volta dona com a resultat el numero de voltes totals.

$$\text{Número de voltes} = \frac{\text{Longitud total serpentí}}{\text{Perímetre 1 volta}}$$

$$\text{Número voltes} = \frac{75}{4.4} = 17 \text{ voltes}$$

La distancia entre voltes es fixa en 1 cm.

L'alçada del serpentí es determina:

$$\text{Alçada} = \text{Diametre extern} \cdot \text{Número voltes} + (\text{Número voltes} - 1) \cdot \text{Distancia entre voltes}$$

$$\text{Alçada serpentí} = 1,47 \text{ m}$$

- **Necessitats de fluid refrigerant**

Per calcular el cabal d'aigua refrigerant necessària, s'utilitza la següent expressió.

$$Q = m \cdot C_p \cdot \Delta T$$

On:

m = Cabal de fluid refrigerant (Kg/s).

C_p=Capacitat calorífica aigua (KJ/Kg °C).

ΔT = Salt tèrmic del fluid refrigerant (°C).

Aïllant el cabal de fluid, l'expressió queda:

$$m = \frac{Q}{C_p \cdot \Delta T} = \frac{794,72 \frac{\text{KJ}}{\text{s}}}{4,18 \frac{\text{KJ}}{\text{Kg} \cdot ^\circ\text{C}} \cdot (40^\circ\text{C} - 20^\circ\text{C})} = 9.5 \text{ Kg/s}$$

Considerant la densitat de l'aigua constant i igual a 1000 Kg/m³ el cabal de fluid refrigerant en m³/s és:

$$\text{Cabal} = 0.0095 \text{ m}^3/\text{s}$$

Es comprova que la velocitat del fluid no sigui ni molt baixa (disminució del Reynolds i per tant, decreixement del coeficient de transferència de calor), ni molt elevada (elevades pèrdues de càrrega que afectarien a la seguretat i a l'operació).

El rang òptim es troba entre 1,5m/s – 3 m/s.

$$\text{Velocitat fluid} = \frac{\text{Cabal fluid}}{\text{Àrea de pas}} = \frac{0.0095}{\pi \cdot (0.07/2)^2} = 2.47 \text{ m/s}$$

La velocitat es troba dins el rang.

- **Aïllant**

Per tal de minimitzar les pèrdues de calor per convecció a través de les parets i fons del reactor, s'aïlla amb un aïllant tèrmic.

Els càlculs es realitzen mitjançant el simulador ISOVER. Fixant la temperatura de l'interior de 100°C i la temperatura exterior de 25°C.

- Gruix de l'aïllant: 40 mm
- Tipus aïllant: Manta Spintex 322 G-27
- Revestiment del reactor: Xapa pintada

- **Disseny del sistema d'agitació i de dispersió de l'hidrogen**

La hidrogenació del PNP implica una reacció trifàsica en la qual l'hidrogen gas a de ser absorbit en la mescla orgànica, alhora que el catalitzador es manté en suspensió. El PNP i l'hidrogen reaccionen quan es troben en un llot actiu en el catalitzador.

L'hidrogen que no ha reaccionat arriba a la superfície del reactor. Quan la pressió d'aquest espai superior del reactor es igual a la pressió d'entrada, l'alimentació d'hidrogen s'atura fins que l'hidrogen superficial es reabsorbit en la mescla.

Per tant el sistema de dispersió i d'agitació són paràmetres clau per la bona absorció de l'hidrogen en la mescla, i així obtenir bons rendiments.

El sistema utilitzat està format per una pala de nou disseny, que reintrodueix per ella mateixa el gas que es troba en la superfície, ja que actua com una turbina interna, recirculant el gas en el líquid mitjançant l'eix buit de l'agitador.

L'alimentació de l'hidrogen es realitza per la pala principal, experimentant una agitació molt intensa que fa augmentar la transferència de matèria gas-líquid.

A més a més d'implantació d'aquest sistema millora la transferència de calor cap al sistema de bescanvi, i suprimeix l'instal·lació de bafles.

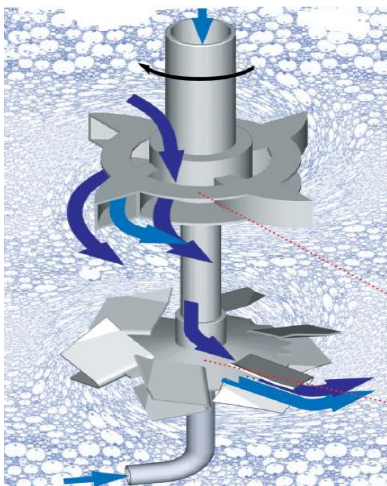


Figura 11.3.3.a. Esquema del sistema d'agitació/dispersi

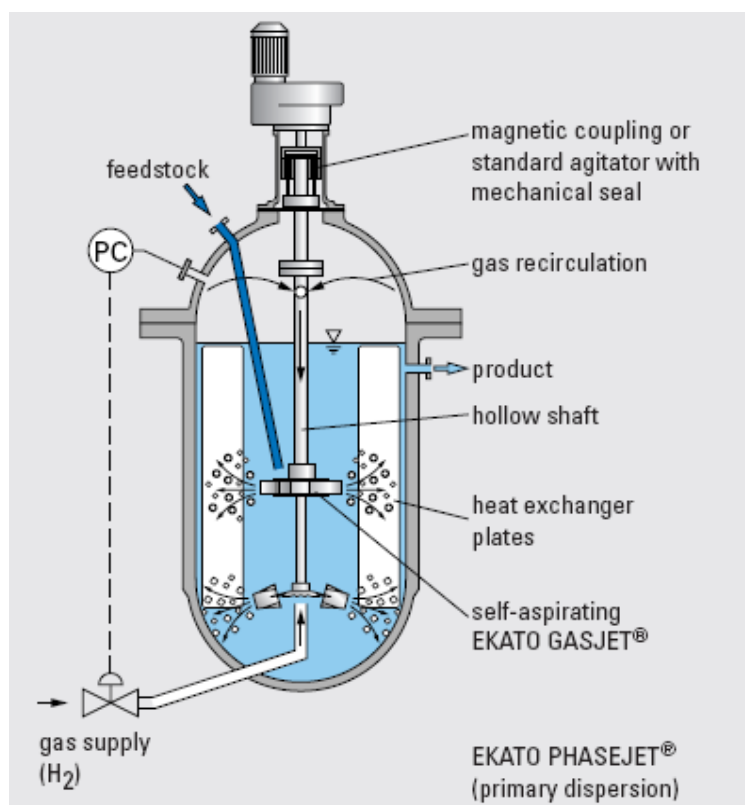


Figura 11.3.3.b. Esquema funcional del reactor hidrogenació i acetilació

Al ser un agitador que correspon a una determinat fabricant, les característiques del agitador son estàndards i es troben dins un rang. La potència es determina amb l'ajuda de la següent gràfica.

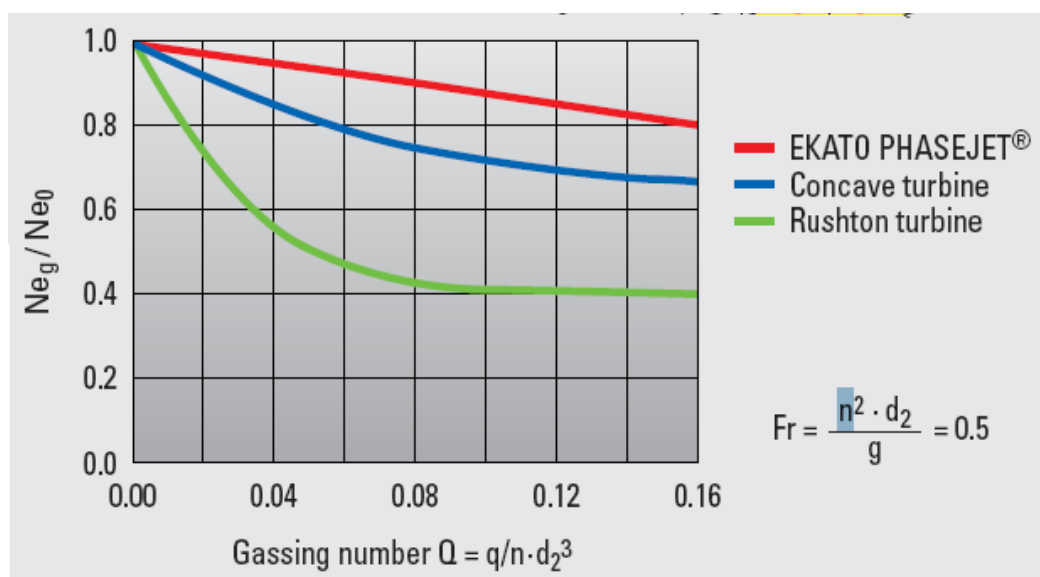


Figura 11.3.3.c. Número d'aireació en funció de la relació dels números de potència amb aireació i sense aireació

L'eix de les x correspon al nombre adimensional d'aireació, i l'eix de les y correspon a la relació entre el numero de potència amb aireació respecte el numero de potencia sense aireació.

$$Q = \frac{q}{n \cdot d^3}$$

On:

q = Cabal d'hidrogen (m³/h)

d= diàmetre agitador (m)

n = velocitat agitació (m/h)

El mòdul de Fr es manté contant i es igual a 0.5, per tant es pot determinar la velocitat d'agitació aïllant-la:

$$n = \sqrt{\frac{0.5 \cdot g}{d}}$$

On:

g = acceleració de la gravetat (m²/s)

d= diàmetre agitador (m)

velocitat agitació (n) = 2.86 s

Un cop determinada la velocitat d'agitació, es calcula el nombre adimensional d'aireació.

$$Q = \frac{15.6 \text{ m}^3/\text{h}}{10296 \text{ m}^3/\text{h} \cdot 0.6 \text{ m}^3} = 0.007$$

Tal i com s'observa a la gràfica anterior el nombre d'aireació correspon a un nombre de potencia d'aireació quasi bé idèntic al nombre de potencia sense aireació ja que la relació entre les dues es aproximadament 1.

Per tan la potència es calcula com si no hagués aireació, fent servir la següent expressió:

$$P = Np \cdot d^5 \cdot n^3 \cdot \rho$$

On Np seria el numero de potencia, que en aquest cas es el mateix al numero de potencia d'aireació.

Primerament es determina el Reynolds.

$$Re = \frac{d \cdot \rho \cdot n}{\mu}$$

On:

d = diàmetre agitador

ρ = densitat mescla (Kg/m³)

n = velocitat agitació (rps)

μ= viscositat mescla (Kg/m·s)

Mitjançant la següent gràfica es determina el numero de potència Np:

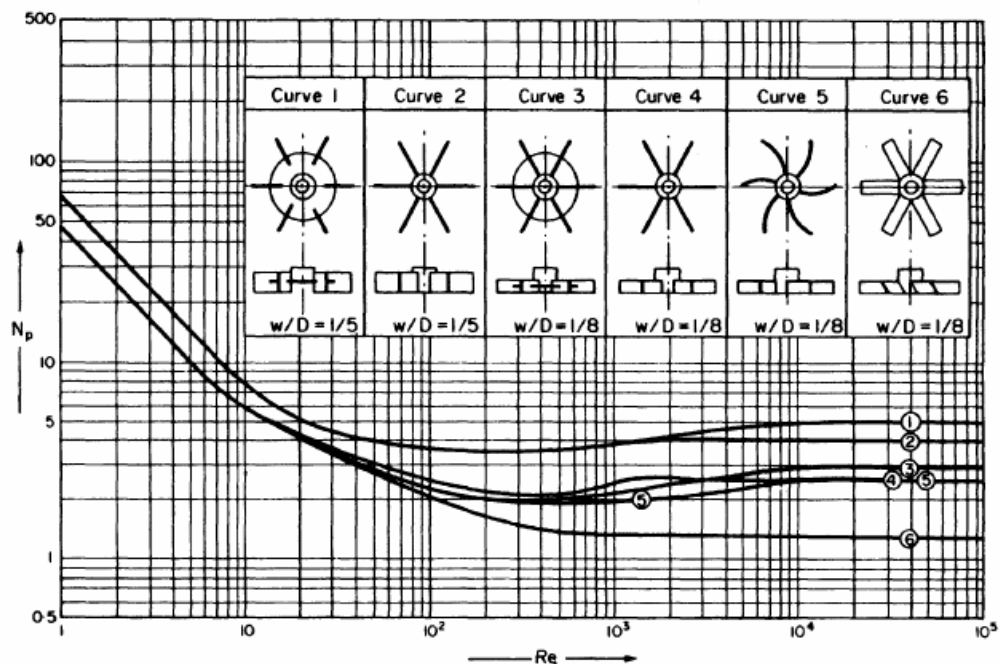


Figura 11.3.3.d. Reynolds en funció de N_p per a diferents sistemes d'agitació

El sistema d'agitació utilitzat és molt semblant a l'agitador numero 1, per tant:

$$N_p = 4$$

Amb aquestes dades i utilitzant l'expressió anterior es determina la potencia necessària:

$$\text{Potencia} = 7800 \text{ W}$$

Les característiques de l'agitador utilitzat són:

- Numero de pales: 6
- Diàmetre agitador: 600 mm
- Distància fons agitador = Longitud del fons torisfèric = 23 cm.
- Potència agitador: 7800W

- **Disseny mecànic del reactor**

Pel disseny mecànic s'ha seguit el mateix procediment que en els reactors R-301/303a.

11.4. DISSENY DELS BESCANVIADORS DE CALOR

11.4.1. Disseny dels bescanviadors de calor de carcassa i tubs

- **Mètode de Kern**

Els bescanviadors de calor utilitzats en aquesta planta són de carcassa i tubs majoritàriament, i el procés utilitzat per a fer el seu disseny ha sigut el *mètode de Kern*. A continuació s'explica com s'ha dissenyat el bescanviador E-301a de l'àrea 300a, per a fer la resta s'ha seguit el mateix procediment.

En aquest cas es vol dissenyar un bescanviador de carcassa i tubs que sigui capaç de refredar un corrent de 15583,3 kg/h d'una mescla d'aigua i àcid nítric al 15% des d'una temperatura de 25 a 2°C. El fluid que s'utilitza per a aconseguir-ho és una mescla d'aigua i glicol al 30%, el qual es considera que és el que circularà per carcassa des d'una temperatura d'entrada de -13 a -5°C. S'ha escollit aquest fluid degut a que és capaç de treballar fins a temperatures de -16°C, cosa que l'aigua només ho pot fer fins a 0°C i no n'hi hauria prou per fer que la mescla es refredés fins a 2°C.

A continuació s'explica com s'ha dut a terme el mètode de Kern.

1. Balanç tèrmic

Abans es pugui fer el balanç tèrmic s'ha de decidir quin és el fluid que circularà per carcassa i quin per tubs. Degut a que la solució d'àcid nítric és corrosiva, i a que és el fluid calent, s'escull que aquesta mescla és la que passarà per tubs. Pel contrari, la mescla refrigerant circularà per carcassa. Una vegada presa aquesta decisió, ja es pot fer el balanç tèrmic:

$$q = m_S \cdot C_{pS} \cdot (t_2 - t_1) = m_t \cdot C_{pt} \cdot (T_1 - T_2)$$

On:

q: calor bescanviat (kW)

Subíndex S: carcassa

Subíndex t: tubs

C_p: calor específic (J/kg°C)

m: cabal màssic (kg/h)

(t₂-t₁): diferència de temperatures entre la sortida i l'entrada del fluid per carcassa

(T₁-T₂): diferència de temperatures entre l'entrada i la sortida del fluid per tubs

De cara a trobar les propietats dels corrents, degut a que els dos són una mescla de dos components, s'ha fet la mitjana ponderada amb les fraccions màssiques i les propietats dels components purs a la temperatura adient; la **taula 11.4.1.a.** en mostra els resultats:

TUBS												
Component	Cabal màssic (kg/h)	x _m	T (°C)		ρ (kg/m³)		μ (kg/ms)		Cp (J/kg°C)		k (W/m°C)	
			E	S	E	S	E	S	E	S	E	S
Aigua	13184,3	0,85	25	2	998,2	1000	0,001	0,0015	4181,8	4200	0,606	0,571
Àcid nítric	2399	0,15	25	2	1520	1520	0,0012	0,0015	2093,4	2093,4	0,279	0,273
Total ó Mitja ponderada	15583,3	1			1078,5	1080,0	0,0013	0,0015	3846,5	3875,7	0,556	0,525
Resultat final					1079,3		0,00127		3868		0,540	
CARCASSA												
Component	Cabal màssic (kg/h)	X _v	T (°C)		ρ (kg/m³)		μ (kg/ms)		Cp (J/kg°C)		k (W/m°C)	
			E	S	E	S	E	S	E	S	E	S
Aigua		0,7	-	-	1070	1057	0,01	0,0035	3642,5	3726,2	0,413	0,473
Glicol		0,3	-	-								
Total ó Mitja ponderada	46383,3	1										
Resultat final					1063,5		0,00675		3684,35		0,443	

Taula 11.4.1.a. Propietats dels corrents de carcassa i tubs.

(*) En el cas del corrent que passa per carcassa, no es posen les propietats per cada component sinó de la mescla en conjunt ja que es van trobar d'aquesta manera.

(**) El resultat final és una mitjana aritmètica entre les mitges ponderades d'entrada i sortida.

On:

x_m : fracció màssica

x_v : fracció volumètrica

E: entrada

S: sortida

ρ : densitat

μ : viscositat

k: conductivitat tèrmica del component

Un exemple de càlcul de la mitja ponderada és:

$$\rho_{\text{tubs,entrada}} = x_{m,\text{aigua}} \cdot \rho_{E,\text{aigua}} + x_{m,\text{nítric}} \cdot \rho_{E,\text{nítric}}$$

Per tant, ja es tenen les dades suficients per calcular el calor bescanviat i el cabal màssic necessari de mescla refrigerant que ha de passar per la carcassa:

$$q = m_t \cdot C_{pt} \cdot (T_1 - T_2) = 15583,3 \frac{\text{kg}}{\text{h}} \cdot \frac{1 \text{ h}}{3600 \text{ s}} \cdot 3857,5 \frac{\text{J}}{\text{kg}^\circ \text{C}} \cdot (25 - 2)^\circ \text{C} = 384,05 \text{ kW}$$

$$m_s = \frac{m_t \cdot C_{pt} \cdot (T_1 - T_2)}{C_{ps} \cdot (t_2 - t_1)} = \frac{15583,3 \frac{\text{kg}}{\text{h}} \cdot 3857,5 \frac{\text{J}}{\text{kg}^\circ \text{C}} \cdot (25 - 2)^\circ \text{C}}{3726 \frac{\text{J}}{\text{kg}^\circ \text{C}} \cdot (-5 + 13)} = 46383,2 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$$

2. Càlcul de DTML

2.1. Decidir tipus de circulació (paral·lel, contracorrent)

Per a calcular la DTML primerament s'ha de decidir quin tipus de circulació es té. Finalment s'ha escollit circulació en contracorrent dels dos fluids; per tant queda:

$$DTML = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}} = 21,64 \quad \text{on,} \quad \begin{aligned} \Delta T_1 &= T_1 - t_2 \\ \Delta T_2 &= T_2 - t_1 \end{aligned}$$

2.2. Decisió del número de passos per carcassa (n_s) i per tubs (n_t)

Al començar a fer el disseny es va partir d'1 número de passos per carcassa i també d'1 número de passos per tubs, però durant el transcurs d'aquest es va anar variant degut a que el nombre de passos per tubs depèn de la velocitat de pas per tubs, i aquesta ha d'estar compresa entre 1 i 2m/s, per tant, s'ha arribat al valor de **10** passos per tub. Per altra banda, el nombre de passos per carcassa s'ha mantingut en 1, ja que el factor de correcció de la DTML és major que 0,85.

3. Correcció de DTML ($DTML)_c$

Per a poder realitzar la correcció de la DTML és necessari saber el nombre de passos per tubs i per carcassa i els increments de temperatura de cada corrent, de manera que es pugui llegir el factor F al gràfic de la **figura 11.4.1.a.**:

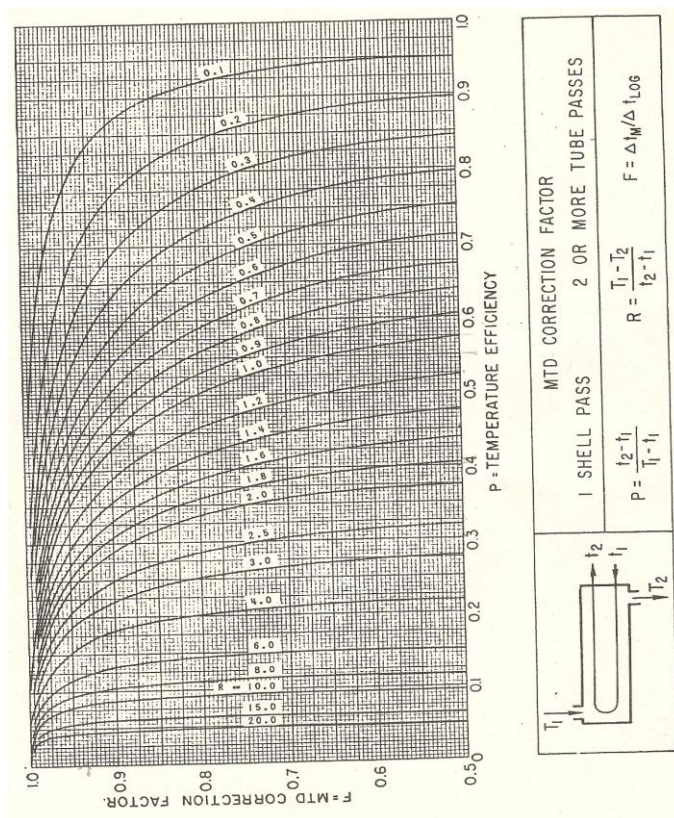


Figura 11.4.1.a. Correcció de DTML per 2 passos per carcassa i 16 passos per tubs.

On,

$$P = \frac{t_2 - t_1}{T_1 - t_1} = 0,21 \quad R = \frac{T_1 - T_2}{t_2 - t_1} = 2,9 \quad \rightarrow \quad F = 0,94$$

$$(DTML)_C = DTML \cdot F = 20,34$$

4. Selecció del bescanviador

4.1 Suposició del coeficient global inicial (U)

Per a poder suposar un coeficient global de transmissió de calor, s'ha de partir que es té com a fluid refrigerant una mescla d'aigua i glicol al 30% i com a fluid de procés una mescla d'aigua i àcid nítric al 15%. Per tant, mirant a la bibliografia (Coulson) s'ha trobat que per a bescanviadors que utilitzen salmorra com a fluid refrigerant (aigua glicolada) i com a fluid calent es té aigua (el més semblant a una mescla diluïda d'àcid nítric), el coeficient global està entre 600 i 1200 W/m²°C, per tant, es parteix d'un valor de **800 W/m²°C**.

4.2 Càlcul de l'àrea total de bescanvi

Una vegada es té el coeficient global i la DTML corregida, ja es pot obtenir l'àrea total necessària per a bescanviar el calor:

$$A = \frac{q}{U \cdot (DTML)_C} = 23,6 \text{ m}^2$$

4.3 Selecció de les característiques dels tubs

En aquest apartat s'ha de decidir quina longitud, diàmetre extern i gruix tenen els tubs continguts dins del bescanviador. Per començar, es va suposar que el diàmetre extern era de 19mm, el qual és un valor acceptable ja que aquest pot estar entre 16 i 50mm. Posteriorment aquest valor es va modificar fins a 20mm ja que sinó s'obtenien pèrdues de càrrega al costat del tub molt elevades. En quant al gruix, es va suposar de 2mm, el qual s'ha mantingut. Per últim, primerament es va partir d'una longitud de 2m però es va ascendir fins a 2,44m (8ft) ja que la relació entre aquesta i el diàmetre de la carcassa ha d'estar dins del rang 4-6m. A la **taula 11.4.1.b.** es mostra un resum dels resultats obtinguts:

D_e (mm)	20
Δx (mm)	2
D_i (mm)	16
L (m)	2,44

Taula 11.4.1.b. Característiques dels tubs

4.4 Distribució dels tubs

Es defineix com a pitch la distància entre els centres de dos tubs consecutius. Pot ser triangular, romboidal o quadrat, en el nostre cas s'ha escollit triangular, ja que proporciona

altres velocitats de transferència de calor. Per tant, degut a que el pitch recomanat és de 1,25 vegades el diàmetre extern del tub, s'obté un pitch de **25 mm**.

4.5 Carcasses

Abans d'escollir el tipus de carcassa, s'han de calcular el nombre de tubs i el diàmetre del feix de tubs:

$$N_t = \frac{A_{\text{total}}}{A_t} = \frac{A_{\text{total}}}{\pi \cdot D_e \cdot L} = 153,9 \cong 154$$

$$D_b = D_e \cdot \left(\frac{N_t}{K_1} \right)^{\frac{1}{n_1}} = 0,45 \text{ m}$$

On:

N_t : nombre de tubs

A_{total} : àrea total de bescanvi (m^2)

A_t : àrea de bescanvi d'1 tub (m^2)

D_b : diàmetre del feix de tubs (m)

K_1, n_1 : constants que depenen del pitch i del nombre de passos per tubs. En aquest cas, es té un pitch triangular i 10 passos per tubs i es considera $K_1=0,0365$ i $n_1=2,675$.

En aquest moment ja es pot escollir el tipus de carcassa, el qual es considera de tipus T, i a partir de la **figura 11.4.1.b.** i del diàmetre del feix de tubs es troba que el diàmetre de la carcassa (D_s) és de **0,54m**.

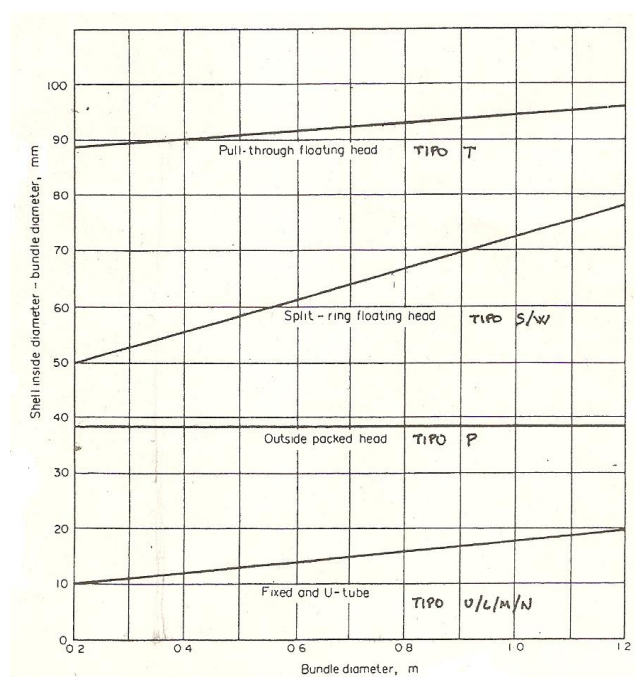


Figura 11.4.1.b. Tipus de carcassa i càlcul de D_s .

Abans de continuar s'ha de comprovar que la relació L/D_s estigui dins l'interval de 4 a 6m, i s'obté un valor de **4,49m**, per tant es pot continuar.

4.6 Càlcul de la superfície de bescanvi d'1 tub (A_t)

Aquesta dada ja s'ha calculat a l'apartat anterior degut a que es necessitava el seu valor, el qual és $0,15\text{m}^2$.

4.7 Selecció número de passos per tub (n_t), a partir de velocitats típiques (v_t)

Com ja s'ha comentat a l'apartat 2.2, primer es va considerar 1 número de passos per tub, però finalment es va veure que amb 10 passos per tubs s'obtenia una velocitat de pas per tubs continguda dins l'interval recomanat (1-2m/s).

A continuació se'n mostra el càlcul:

$$v_t = \frac{m_t}{\rho \cdot A_{\text{pas1tub}} \cdot N_{tp}} = 1,29 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

$$N_{tp} = \frac{N_t}{n_t} = 15,4$$

$$A_{\text{pas1tub}} = \frac{\pi}{4} D_i^2 = 2,01 \cdot 10^{-4} \text{m}^2$$

On:

N_{tp} : nombre de tubs per pas

n_t : número de passos per tub

N_t : número total de tubs

4.8 Determinació del número de pantalles deflectores i separació entre elles

L'espai que queda entre la pantalla i la carcassa s'anomena *baffle cut*, i s'ha escollit que sigui un 20% del diàmetre de carcassa, ja que els valors òptims oscil·len entre el 20 i 25%. L'espaiat entre pantalles (l_B) òptim, en canvi, és de 0,3 a 0,5 vegades el diàmetre de carcassa, el qual s'ha escollit un valor de 0,4. Per tant, els resultats obtinguts són:

$$\text{bafflecut} = 108,6\text{mm} \quad ; \quad l_B = 217,3\text{mm}$$

Per a calcular el número de pantalles deflectores es fa servir l'expressió següent:

$$n^{\circ}\text{pantalles} = \frac{L}{l_B} - 1 = 10,2 \xrightarrow{\text{s'arrodoneix a la baixa}} 10$$

5. Correcció de la U del bescanviador

Per a la correcció de la U suposada es té en compte el nombre de tubs a l'hora de calcular l'àrea total de bescanvi de calor:

$$A = N_t \cdot \pi \cdot L \cdot D_e = 23,6\text{m}^2$$

Per tant, el coeficient global corregit és:

$$U = \frac{q}{A \cdot (DTML)_C} = 799,7 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C}}$$

6. Determinació de la U del bescanviador a partir del càlcul dels coeficients individuals i factors d'embrutiment.

6.1 Coeficient de convecció costat tub.

6.1.1. Determinació de les propietats físiques del fluid

Les propietats del fluid ja s'han calculat prèviament i són a la **taula 11.4.1.a**.

6.1.2. Secció de pas

L'àrea de pas de tots els tubs d'un mateix pas (A_{past}) es calcula de la manera següent:

$$A_{\text{past}} = N_t \cdot \frac{A_{\text{pas1tub}}}{n_t} = 3,01 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$$

6.1.3. Diàmetre equivalent costat tubs

El diàmetre equivalent és simplement el diàmetre intern dels tubs, per tant 16mm.

6.1.4. Cabal màssic per unitat d'àrea. Densitat de flux màssic (G_{tub})

$$G_{\text{tub}} = \frac{m_t}{A_{\text{past}}} = 1398 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2 \text{s}}$$

6.1.5. Càlcul dels números de Reynolds i Prandtl

Les propietats físiques a utilitzar fan referència al fluid que circula per tubs. Els resultats són:

$$Re_t = \frac{D_i \cdot G_{\text{tub}}}{\mu} = 1,81 \cdot 10^4 \quad ; \quad Pr_t = \frac{C_p \cdot \mu}{k} = 8,13$$

6.1.6. Càlcul del coeficient individual de transmissió de calor costat tub (h_i)

Aquest càlcul es fa a partir del factor de transferència de calor (j_h), el qual es troba amb la **figura 11.4.1.c** i els valors de $Re_t = 1,81 \cdot 10^4$ i $L/D_i = 152,5\text{m}$:

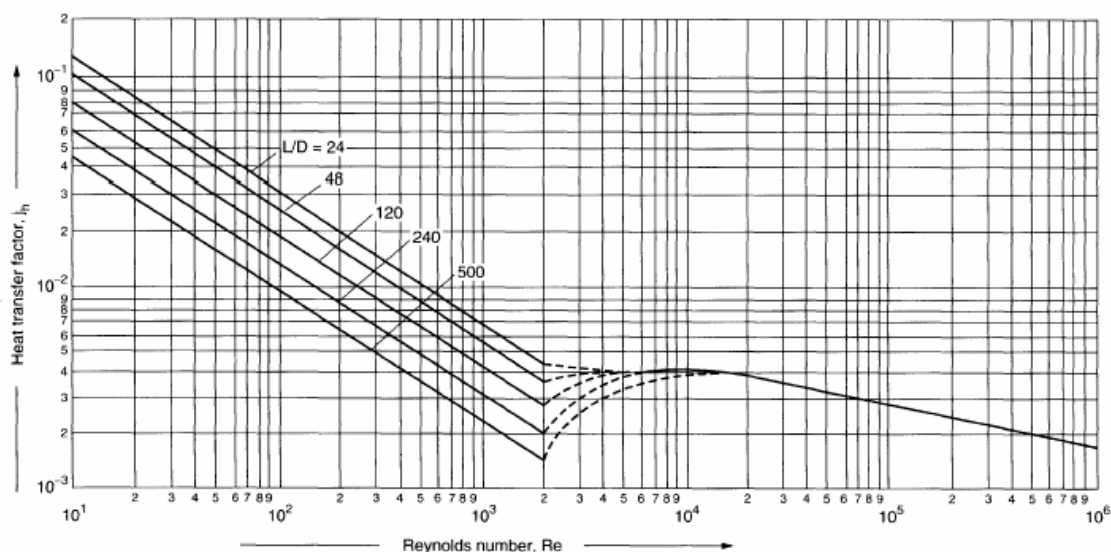


Figura 11.4.1.c. Factor de transferència de calor per costat dels tubs.

Es troba que $j_h = 4 \cdot 10^{-3}$, i a partir d'aquí ja es pot calcular el coeficient individual de transmissió de calor pel costat dels tubs:

$$h_t = \frac{j_h \cdot Re_t \cdot Pr_t^{0,33} \cdot k}{D_i} \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0,14} = 5297,8 \frac{W}{m^2 \cdot ^\circ C}$$

Es considera que la viscositat del fluid a la seva temperatura és la mateixa respecte la temperatura de la paret, ja que aquesta és de $11^\circ C$ i la temperatura mitja dels tubs és de $14,5$; per tant el quocient entre viscositats es redueix a 1.

Observant valors típics de coeficients individuals per solucions aquoses, aquest es troba entre 1500 i $12000 W/m^2 \cdot ^\circ C$. Es considera aquest valor com a correcte, ja que no s'han trobat valors específics per a mesclades d'aigua i nítric al 15%.

6.2 Coeficient de convecció costat carcassa

6.2.1. Càlcul de l'àrea transversal de la carcassa (A_{ST})

$$A_{ST} = \frac{l_B \cdot D_S \cdot (\text{pitch} - D_e)}{\text{pitch} \cdot n_s} = 2,36 \cdot 10^{-2} m^2$$

6.2.2. Càlcul del cabal màssic per unitat d'àrea (G_s) i de la velocitat de carcassa (v_s)

$$G_s = \frac{m_s}{A_{ST}} = 545,9 \frac{kg}{m^2 s} \quad ; \quad v_s = \frac{m_s}{A_{ST} \cdot \rho_s} = 0,52 \frac{m}{s}$$

Es comprova que v_s estigui dins dels límits, els quals són de $0,3$ a $1 m/s$; per tant s'observa que pertany dins d'aquests valors.

6.2.3. Càlcul del diàmetre equivalent de carcassa (d_{eq})

El diàmetre equivalent és funció del pitch, per tant, en el cas de ser triangular es calcula amb la següent expressió:

$$d_{eq} = \frac{1,10}{D_e} (\text{pitch}^2 - 0,917 \cdot D_e^2) = 0,014 \text{ m}$$

6.2.4. Càlcul dels números de Reynolds i Prandtl

En aquest cas s'utilitzen les propietats per al fluid que passa per carcassa (mescla aigua i glicol al 30%):

$$Re_S = \frac{d_{eq} \cdot G_S}{\mu} = 2,21 \cdot 10^3 \quad ; \quad Pr_S = \frac{C_p \cdot \mu}{k} = 27,7$$

6.2.5. Càlcul del coeficient individual de transmissió de calor

costat

carcassa (h_s)

Per a saber el coeficient es necessita saber el valor del factor de transferència de calor. Per això, es necessita saber el percentatge de baffle cut respecte el diàmetre de la carcassa i el Reynolds. Per tant, per un baffle cut del 40% i Re_S de $2,21 \cdot 10^3$ s'obté una j_h de $1,0 \cdot 10^{-2}$. S'ha utilitzat la **figura 11.4.1.d.**:

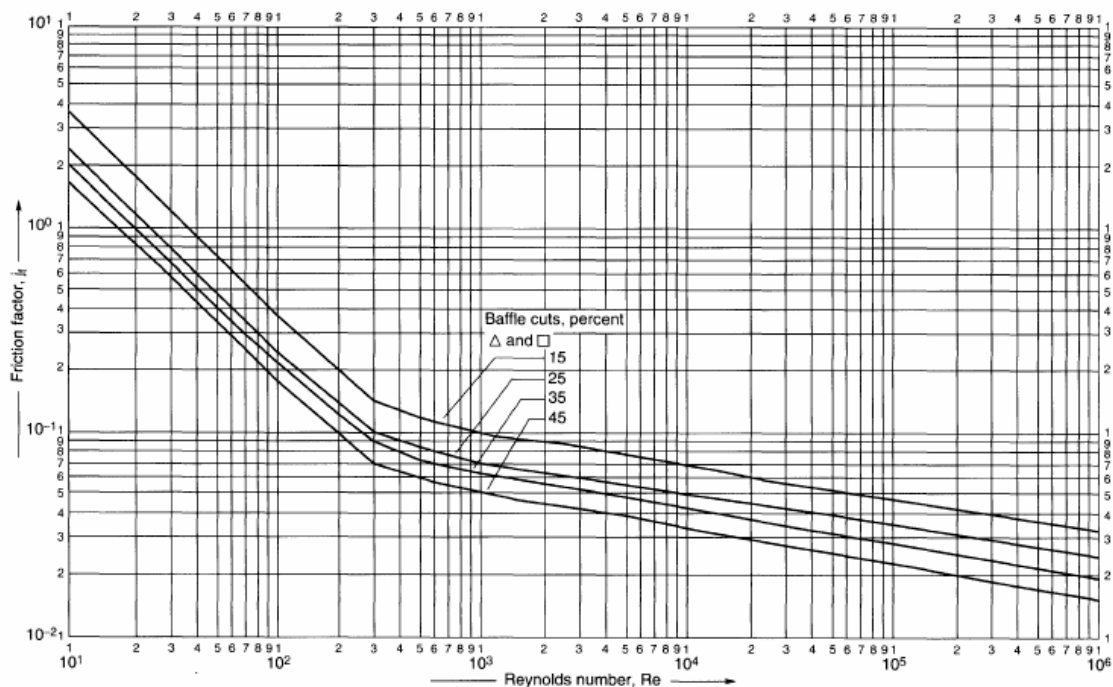


Figura 11.4.1.d. Factor de transferència de calor per costat de la carcassa.

Ara ja es pot calcular la h_s :

$$h_s = \frac{j_h \cdot Re_S \cdot Pr_S^{0,33} \cdot k}{d_{eq}} \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0,14} = 2738,5 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C}}$$

Al no tenir valors de coeficients individuals referents a la mescla d'aigua i glicol al 30%, ho comparem amb els mateixos valors que abans ja que també es tracta d'una solució aquosa. Per tant, es pot observar que està dins de l'interval de 1500 a 12000 W/m²°C.

7. Càlcul del coeficient global U a partir dels coeficients individuals (en aquest cas referit a l'àrea externa) (U_R).

L'expressió utilitzada per al càlcul és la següent:

$$\frac{1}{U_R} = \frac{1}{h_S} + \frac{1}{h_{RS}} + \frac{D_e \cdot \ln\left(\frac{D_e}{D_i}\right)}{2 \cdot k} + \frac{D_e}{D_i} \cdot \frac{1}{h_{RT}} + \frac{D_e}{D_i} \cdot \frac{1}{h_t}$$

On,

K: conductivitat tèrmica del material (W/m°C)

h_{RS}: factor d'embrutiment del costat de la carcassa (W/m²°C)

h_{RT}: factor d'embrutiment del costat dels tubs (W/m²°C)

Els valors que s'han escollit com a factors d'embrutiment són 5000 W/m²°C per al costat dels tubs i carcassa, ja que està dins l'interval de valors típics per al cas de salmorra, i per al costat de carcassa s'ha triat 5000 W/m²°C perquè s'ha considerat que la mescla d'aigua i nítric no embruta massa tampoc.

Degut a que s'utilitza acer inoxidable AISI304, la k té un valor de 16 W/m°C, per tant el resultat obtingut del càlcul del coeficient global és de 839,9 W/m²°C. Això suposa un increment del 5% respecte el valor suposat, el que significa que està sobredimensionat, però al no superar el 15% es considera com a vàlid.

8. Càlcul de les pèrdues de pressió

8.1 Costat tubs

Per al càlcul de les pèrdues de pressió es consideren que aquestes són degudes a les contraccions i expansions, l'expressió és la següent:

$$\Delta P_t = n_t \cdot \left[8 \cdot j_f \cdot \left(\frac{L}{D_i} \right) \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{-m} + 2,5 \right] \cdot \frac{\rho \cdot v_t^2}{2}$$

Abans es necessita buscar el factor de fricció (j_f) el qual s'obté a partir de la **figura 11.4.1.e** i el número de Reynolds:

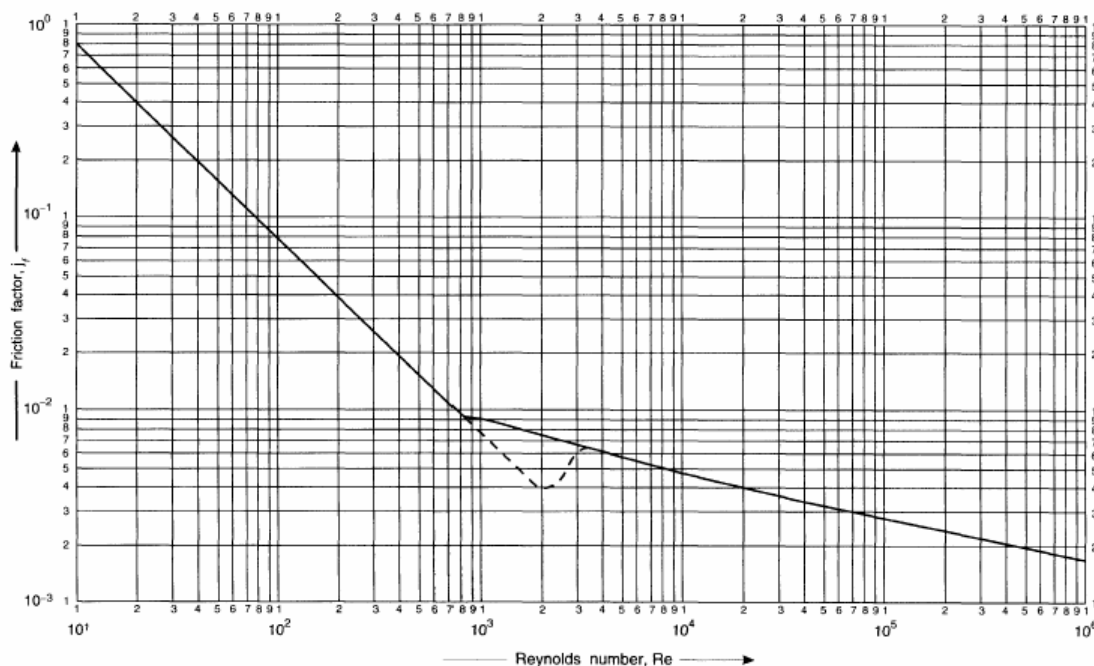


Figura 11.4.1.e. Factor de fricció per al costat dels tubs.

El valor obtingut de j_f és de $4,2 \cdot 10^{-3}$, i les pèrdues de pressió són **68,9 kN/m²**, el que significa que estem dins l'interval ja que no es pot sobrepassar els 70 kN/m² per fluids amb una viscositat entre 1 i 10 cP.

8.2 Costat carcassa

L'expressió per al càlcul de les pèrdues de pressió és la següent:

$$\Delta P_S = n_S \cdot 8 \cdot j_f \cdot \left(\frac{D_S}{d_{eq}} \right) \cdot \left(\frac{L}{l_b} \right) \cdot \frac{\rho \cdot v_S^2}{2} \cdot \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{-0,14}$$

On j_f es troba mitjançant la **figura 11.4.1.f.**:

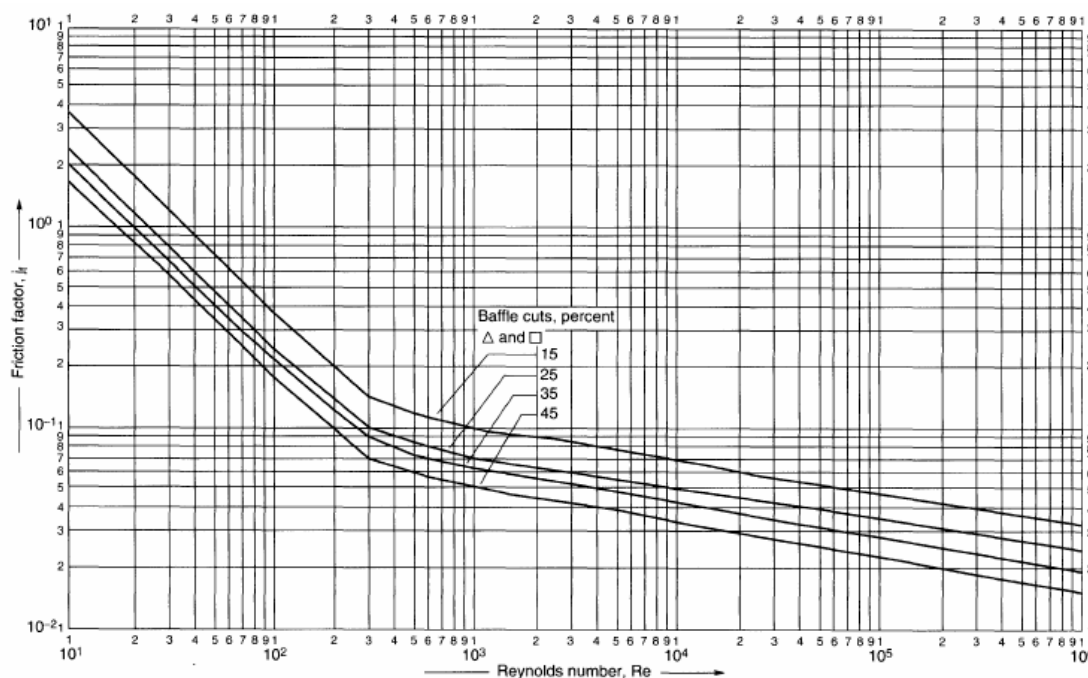


Figura 11.4.1.f. Factor de fricció per al costat de la carcassa.

S'observa que j_f té un valor de $5 \cdot 10^{-2}$ i que les pèrdues són $24,2 \text{ kN/m}^2$, les quals també es situen dins l'interval i per tant es dona el disseny com a bo.

- **Càlcul del pes del bescanviador**

Per a calcular el pes del bescanviador, abans s'ha de saber el gruix de la carcassa. Per a trobar-lo, es segueix la normativa ASME, i tal i com s'ha fet en els tancs d'emmagatzematge es troba que es necessita un gruix de 2mm per una pressió de disseny de 2 bar. Per tant, per a calcular el pes de la carcassa, es fa de la següent forma:

$$P_{\text{carcassa}} = V_{\text{carcassa}} \rho_{\text{material}} = \pi \cdot D_S \cdot L \cdot t \cdot \rho_{\text{material}} = \mathbf{66,87 \text{ kg}} \quad \text{on,}$$

V_{carcassa} : volum de la carcassa (m^3)

L : longitud de la carcassa (m)

t : gruix de la carcassa (m)

Per al càlcul del pes dels capçals s'ha fet com si aquests fossin toriesfèrics, tot i que en realitat només ho és un, però s'ha fet per simplificar els càlculs. S'ha seguit el mateix procediment explicat en el cas dels tancs d'emmagatzematge, i s'ha obtingut un valor de **4,64kg** (comptant els dos capçals).

Per completar el pes de l'equip buit, també s'ha de tenir en compte el pes dels tubs, el qual es calcula:

$$P_{\text{tubs}} = \pi \cdot D_i \cdot \Delta x \cdot L \cdot N_t \cdot \rho_{\text{material}} = \mathbf{303,34 \text{ kg}} \quad \text{on,}$$

Di: diàmetre intern tub (m)

Δx : gruix del tub (m)

L: longitud dels tubs (m)

N_i : nombre de tubs

Per tant, el pes de l'equip buit total és **374,84kg**.

A continuació, s'ha de calcular el pes de l'equip en operació. En el cas del pes de la carcassa en operació és:

$$P_{\text{carcassaple}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_S^2 \cdot L \cdot \rho_{\text{carcassal}} + P_{\text{carcassa}} = \mathbf{664,47kg}$$

En el cas dels tubs:

$$P_{\text{tubspie}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_i^2 \cdot L \cdot \rho_{\text{tubs}} + P_{\text{tubs}} = \mathbf{384,92kg}$$

Per tant, el pes de l'equip en operació total és:

$$P_{\text{equip,operació}} = P_{\text{carcassaple}} + P_{\text{tubspie}} + P_{\text{capçals}} = \mathbf{1054,03kg}$$

11.4.2. Disseny dels bescanviadors de calor de doble tub

Aquest disseny fa referència al bescanviador E-404b, el qual requereix una àrea de bescanvi de calor menor de $2m^2$ i per això s'ha de recórrer a utilitzar un bescanviador de doble tub enlloc d'un de carcassa i tubs.

En aquest cas es vol dissenyar un bescanviador de doble tub que sigui capaç de refredar un corrent de 1002,6 kg/h d'una mescla d'aigua, APAP, PNP i àcid acètic glacial des d'una temperatura de 110 a 75°C. El fluid que s'utilitza per aconseguir-ho és aigua de torres, la qual es considera que és la que circularà pel tub extern des d'una temperatura d'entrada de 20 a 40°C.

El procediment és el següent:

1. Balanç tèrmic

$$q = m_T \cdot C_{pT} \cdot (t_2 - t_1) = m_t \cdot C_{pt} \cdot (T_1 - T_2)$$

On:

q: calor bescanviat (kW)

Subíndex T: tub exterior

Subíndex t: tub interior

C_p: calor específic (J/kg°C)

m: cabal màssic (kg/h)

(t₂-t₁): diferència de temperatures entre la sortida i l'entrada del fluid pel tub exterior

(T₁-T₂): diferència de temperatures entre l'entrada i la sortida del fluid pe tub interior

Les propietats dels corrents es mostren a continuació:

TUB INTERIOR								
Component	Cabal màssic (kg/h)	x _m	T (°C)		ρ (kg/m³)	μ (kg/ms)	Cp (kJ/kg°C)	k (W/m°C)
APAP	189,54	0,189	110	75	1293	1,00·10 ⁻³	0,66	--
Aigua	12,236	0,012	110	75	1000	2,19E·10 ⁻⁴	4,18	0,684
Àcid acètic	800	0,798	110	75	149	3,89·10 ⁻⁴	2,08	0,1423
PNP	0,807	0,001	110	75	1480	2,00·10 ⁻³	1,04	---
Total ó Mitja ponderada	1002,6	1,000			1094,9	5,04·10 ⁻⁴	2,057	0,122
ANEL·L EXTERIOR								
Component	Cabal màssic (kg/h)	T (°C)		ρ (kg/m³)	μ (kg/ms)	Cp (J/kg°C)	k (W/m°C)	
Aigua	863,74	20	40	994	7,84·10 ⁻⁴	4,18	0,64	

Taula 11.4.2.a. Propietats dels corrents del bescanviador de doble tub.

On:

x_m: fracció màssica

ρ: densitat

μ: viscositat

k: conductivitat tèrmica del component

$$q = m_t \cdot C_{pt} \cdot (T_1 - T_2) = 1002,58 \frac{\text{kg}}{\text{h}} \cdot \frac{1\text{h}}{3600\text{s}} \cdot 2057 \frac{\text{J}}{\text{kg}^\circ\text{C}} \cdot (130 - 75)^\circ\text{C} = \mathbf{20,05\text{kW}}$$

$$m_T = \frac{m_t \cdot C_{pt} \cdot (T_1 - T_2)}{C_{pT} \cdot (t_2 - t_1)} = \frac{1102,58 \frac{\text{kg}}{\text{h}} \cdot 2057 \frac{\text{J}}{\text{kg}^\circ\text{C}} \cdot (130 - 75)^\circ\text{C}}{4178 \frac{\text{J}}{\text{kg}^\circ\text{C}} \cdot (40 - 20)} = \mathbf{863,74 \frac{\text{kg}}{\text{h}}}$$

2. Càlcul de DTML

2.1. Decidir tipus de circulació (paral·lel, contracorrent)

Per a calcular la DTML primerament s'ha de decidir quin tipus de circulació es té. Finalment s'ha escollit circulació en contracorrent dels dos fluids; per tant queda:

$$DTML = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}} = \mathbf{62,20} \quad \text{on,} \quad \begin{aligned} \Delta T_1 &= T_1 - t_2 \\ \Delta T_2 &= T_2 - t_1 \end{aligned}$$

En quant a decidir quin fluid passa per l'interior o l'exterior del tub, es mira a la **taula 11.4.2.b.** l'àrea de flux que passa per l'interior i anell exterior del tub per les mides típiques d'aquest:

Intercambiador, IPS	Àrea de flujo, plg ²		Anulo plg	
	Anulo	tubo	d_e	d'_e
2 × 1 $\frac{1}{4}$	1.19	1.50	0.915	0.40
2 $\frac{1}{2}$ × 1"	2.63	1.50	2.02	0.81
3 × 2	2.93	3.35	1.57	0.69
4 × 3	3.14	7.38	1.14	0.53

Taula 11.4.2.b. Àrees de flux i diàmetres equivalents per bescanviadors de doble tub.

Si en un principi s'escull uns tubs de diàmetre nominal extern 2" i de 1 $\frac{1}{4}$ " de diàmetre nominal intern, es veu que l'àrea que passa pel tub intern és major, per tant, el cabal màssic major hauria de passar per aquesta, cosa que es compleix ja que la mescla que s'ha de refredar té un cabal màssic major.

3. Dimensions dels tubs

Tal i com s'ha comentat, s'escull uns tubs de diàmetre nominal 2"x1 $\frac{1}{4}$ ", el que significa que es tindran les mides que marca la **taula 11.4.2.c:**

Tamaño nominal del tubo, IPS plg	DE, plg	Cédula No.	DI, plg	Area de flujo por tubo, plg ²	Superficie por pie lineal, pies ² /pie		Peso por pie lineal, lb de acero
					Exterior	Interior	
1/8	0.405	40*	0.269	0.058	0.106	0.070	0.25
		80†	0.215	0.036		0.056	0.32
1/4	0.540	40*	0.364	0.104	0.141	0.095	0.43
		80†	0.302	0.072		0.079	0.54
3/8	0.675	40*	0.493	0.192	0.177	0.129	0.57
		80†	0.423	0.141		0.111	0.74
1/2	0.840	40*	0.622	0.304	0.220	0.163	0.85
		80†	0.546	0.235		0.143	1.09
3/4	1.05	40*	0.824	0.534	0.275	0.216	1.13
		80†	0.742	0.432		0.194	1.48
1	1.32	40*	1.049	0.864	0.344	0.274	1.68
		80†	0.957	0.718		0.250	2.17
1 1/4	1.66	40*	1.380	1.50	0.435	0.362	2.28
		80†	1.278	1.28		0.335	3.00
1 1/2	1.90	40*	1.610	2.04	0.498	0.422	2.72
		80†	1.500	1.76		0.393	3.64
2	2.38	40*	2.067	3.35	0.622	0.542	3.66
		80†	1.939	2.95		0.508	5.03
2 1/2	2.38	40*	2.469	4.79	0.753	0.647	5.80
		80†	2.323	4.23		0.609	7.67
3	3.50	40*	3.068	7.38	0.917	0.804	7.58
		80†	2.900	6.61		0.760	10.3
4	4.50	40*	4.026	12.7	1.178	1.055	10.8
		80†	3.826	11.5		1.002	15.0
6	6.625	40*	6.065	28.9	1.734	1.590	19.0
		80†	5.761	26.1		1.510	28.6
8	8.625	40*	7.981	50.0	2.258	2.090	28.6
		80†	7.625	45.7		2.000	43.4
10	10.75	40*	110.02	78.8	2.814	2.62	40.5
		60	9.75	74.6		2.55	54.8
12	12.75	30	12.09	115	3.338	3.17	43.8
14	14.0	30	13.25	138	3.665	3.47	54.6
16	16.0	30	15.25	183	4.189	4.00	62.6
18	18.0	20†	17.25	234	4.712	4.52	72.7
20	20.0	20	19.25	291	5.236	5.05	78.6
22	22.0	20†	21.25	355	5.747	5.56	84.0
24	24.0	20	23.25	425	6.283	6.09	94.7

Taula 11.4.2.c. Dimensions de tubs d'acer (IPS)

Per tant, es veu que en aquest cas els tubs tindran les mides següents:

	Tub intern		Tub extern	
DN	1 1/4"		2"	
D _i	1,38"	0,035m	2,067"	0,052m
D _e	1,66	0,042m	2,38"	0,060m

Taula 11.4.2.d. Dimensions de tubs d'acer de 2"x 1 1/4",

DN: diàmetre nominal

D_i: diàmetre intern

D_e: diàmetre extern

4. Fluid calent: tub interior, mescla

4.1. Àrea de flux

$$A_i = \frac{\pi}{4} \cdot D_{it}^2 = 9,65 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$$

D_{it} : diàmetre intern del tub interior (m)

4.2. Cabal màssic per unitat d'àrea

$$G_i = \frac{q}{A_i} = 1,04 \cdot 10^6 \frac{\text{kg}}{\text{h} \cdot \text{m}^2}$$

4.3. Càlcul del Reynolds i Prandtl

$$Re_i = \frac{D_{it} \cdot G_i}{\mu} = 2,01 \cdot 10^4 \quad ; \quad Pr_i = \frac{C_p \cdot \mu}{k} = 8,50$$

4.4. Càlcul de j_H

Sabent el Reynolds i mirant la **figura 11.4.2.a.**, es troba el valor de j_H , el qual es necessita per al càlcul del coeficient de transferència de calor per al costat del tub interior:

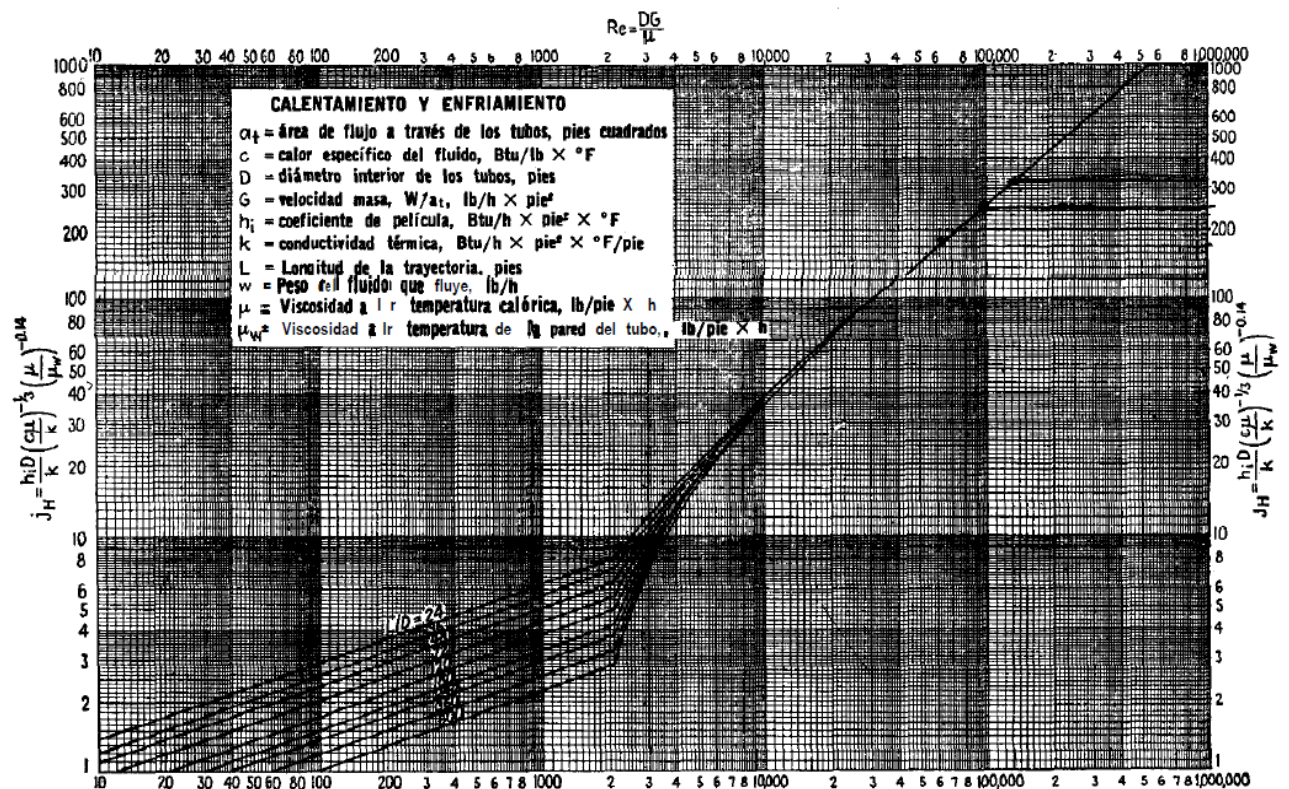


Figura 11.4.2.a. Corba de transferència de calor pel costat dels tubs.

S'observa que s'arriba a un valor de 70.

4.5. Càlcul del coeficient de transferència de calor

$$h_i = \frac{j_H \cdot k \cdot Pr^{1/3}}{D_{it}} = 496,81 \frac{W}{m^2 \cdot ^\circ C}$$

Degut a que s'utilitza la superfície exterior del tub interior com la superfície de referència per al càlcul de $q=UA\Delta T$, aquest coeficient s'ha de corregir ja que ha estat calculat respecte l'àrea interna:

$$h_{io} = h_i \cdot \frac{D_{it}}{D_{et}} = 413,01 \frac{W}{m^2 \cdot ^\circ C}$$

D_{et} : diàmetre extern del tub interior (m)

5. Fluid fred: anell exterior, aigua de refrigeració**5.1. Àrea de flux**

$$A_e = \frac{\pi}{4} (D_{iT}^2 - D_{et}^2) = 7,69 \cdot 10^{-4} m^2$$

D_{iT} : diàmetre intern del tub exterior (m)

5.2. Cabal màssic per unitat d'àrea

$$G_e = \frac{q}{A_{ei}} = 1,12 \cdot 10^6 \frac{kg}{h \cdot m^2}$$

5.3. Càlcul del Reynolds i Prandtl

$$Re_e = \frac{D_{eq} \cdot G_e}{\mu} = 9,24 \cdot 10^3 \quad ; \quad Pr_e = \frac{C_p \cdot \mu}{k} = 5,12$$

D_{eq} : diàmetre equivalent (m), el qual es calcula:

$$D_{eq} = \frac{D_{iT}^2 - D_{et}^2}{D_{et}} = 0,023m$$

5.4. Càlcul de j_H

Observant a la **figura 11.4.2.a.**, es troba un valor de j_H de 30.

5.5. Càlcul del coeficient de transferència de calor

$$h_e = \frac{j_H \cdot k \cdot Pr^{1/3}}{D_{eq}} = 1425,62 \frac{W}{m^2 \cdot ^\circ C}$$

6. Coeficient global de transferència de calor net

$$U_C = \frac{h_{uo} \cdot h_e}{h_{uo} + h_e} = 320,24 \frac{W}{m^2 \cdot ^\circ C}$$

7. Coeficient global de transferència de calor de disseny

Tenint en compte que hi poden haver incrustacions i deposicions de sòlids en suspensió, s'ha d'introduir aquest terme en el càlcul del coeficient global de disseny. Mirant a la bibliografia, s'escullen com a factors d'incrustació pel costat interior i exterior els següents:

R_{di} : factor d'incrustació pel costat interior, $5000 \text{ W/m}^2\text{°C}$

R_{do} : factor d'incrustació pel costat exterior, $3000 \text{ W/m}^2\text{°C}$

Per tant, el coeficient global de disseny és el següent:

$$\frac{1}{U_D} = \frac{1}{U_C} + \frac{1}{R_{di}} + \frac{1}{R_{do}} \rightarrow U_D = 273,52 \frac{\text{W}}{\text{m}^2\text{°C}}$$

8. Superfície requerida

$$q = U_D \cdot A \cdot \Delta T_{ML} \rightarrow A = \frac{q}{U_D \cdot \Delta T_{ML}} = 1,18 \text{ m}^2$$

Observant la **taula 11.4.2.d.**, se veu que per un tub interior de $1^{1/4}$ ", hi ha $0,435 \text{ ft}^2$ de superfície externa per un peu de longitud, el que és el mateix que $0,132 \text{ m}^2/\text{m}$. Per tant, la longitud requerida és:

$$L_{req} = \frac{1,50 \text{ m}^2}{0,132 \frac{\text{m}^2}{\text{m}}} = 8,89 \text{ m}$$

Les longituds efectives típiques d'aquests bescanviadors són de 12, 15 o 20 peus, tenint en compte que la longitud efectiva és la que es mostra a la **figura 11.4.2.b.**:

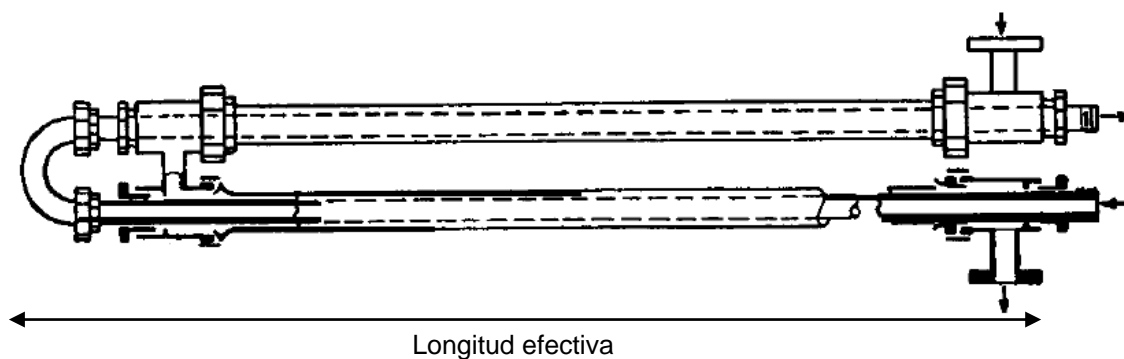


Figura 11.4.2.b. Bescanviador de doble tub.

El bescanviador de la figura superior consta només d'una forquilla, la qual aquesta és la U que formen els tubs. Per tant, per a calcular el nombre de forquilles que es necessiten es segueix el següent procediment considerant que es disposa d'una longitud efectiva de 15 peus ($4,572 \text{ m}$):

$$n^{\circ} \text{forquilles} = \frac{L_{req}}{L_{efectiva} \cdot 2} = \frac{8,89 \text{ m}}{4,572 \cdot 2 \text{ m}} = 0,97 \approx 1 \text{ forquilla}$$

9. Recàlcul de la superfície requerida i el coeficient global

Sabent que es té una forquilla amb longitud efectiva de 4,572m, la longitud total serà:

$$L_{\text{total}} = n^{\circ} \text{forquilles} \cdot L_{\text{efectiva}} = 9,14 \text{ m}$$

Per tant, l'àrea i el coeficient global seran:

$$A = L_{\text{total}} \cdot 0,132 \frac{\text{m}^2}{\text{m}} = 1,21 \text{ m}^2 \quad ; \quad U_D = \frac{q}{DTML \cdot A} = 265,89 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot ^{\circ}\text{C}}$$

10. Caiguda de pressió**10.1 Tub interior****10.1.1 Factor de fricció**

Es calcula a través de l'equació de Fanning:

$$f_i = 0,035 + \frac{0,264}{\text{Re}_i^{0,42}} = 7,62 \cdot 10^{-3}$$

10.1.2 Pèrdues de pressió

$$\Delta P_i = \frac{4 \cdot f_i \cdot G_i^2 \cdot L_{\text{total}}}{2 \cdot g \cdot \rho \cdot \text{it}} = 41,9 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2} = 0,058 \frac{\text{lb}}{\text{in}^2}$$

Es pot veure que dona un valor acceptable ja que les pèrdues no poden sobrepassar les 10 lb/in².

10.2 Anell exterior**10.2.1 Factor de fricció**

Primerament s'ha de recalculer el diàmetre equivalent, ja que en el cas de les pèrdues de pressió es calcula de la forma següent:

$$D_{\text{eqp}} = D_{\text{IT}} - D_{\text{et}} = 0,0103 \text{ m}$$

Per tant el Reynolds també canvia:

$$\text{Re}_{\text{ep}} = \frac{D_{\text{eqp}} \cdot G_e}{\mu} = 4,12 \cdot 10^3$$

El factor de fricció es calcula a través de l'equació de Fanning:

$$f_e = 0,035 + \frac{0,264}{\text{Re}_{\text{ep}}^{0,42}} = 1,15 \cdot 10^{-2}$$

10.2.2 Pèrdues de pressió

$$\Delta P_e = \frac{4 \cdot f_e \cdot G_e^2 \cdot L_{\text{total}}}{2 \cdot g \cdot \rho^2 D_{\text{eqp}}} = 0,205 \text{ m}$$

En aquest cas també s'han de tenir en compte les pèrdues per forquilla:

$$\Delta P_{\text{ef}} = \frac{v^2}{2 \cdot g} = \frac{\left(\frac{G_e}{\rho}\right)^2}{2 \cdot g} = 5,03 \cdot 10^{-3} \text{ m}$$

Per tant, les pèrdues totals són:

$$\Delta P_t = (\Delta P_e + \Delta P_{ef}) \cdot \rho = 20843 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2} = 0,296 \frac{\text{lb}}{\text{in}^2}$$

Es pot veure que en aquest cas també dóna un valor acceptable ja que les pèrdues no sobrepassen les 10lb/in².

11. Pes de l'equip

11.1 Pes de l'equip buit

11.1.1 Tub intern

$$P_{i,buit} = \pi \cdot D_{it} \cdot (D_{et} - D_{it}) \cdot L_{total} \cdot \rho_{material} = 57,50\text{kg}$$

La densitat del material (acer AISI 304) és 8030kg/m³.

11.1.2 Anell extern

$$P_{e,buit} = \pi \cdot D_{iT} \cdot (D_{eT} - D_{iT}) \cdot L_{total} \cdot \rho_{material} = 96,28\text{kg}$$

11.1.3 Total

$$P_{buit} = P_{i,buit} + P_{e,buit} = 153,79\text{kg}$$

11.2 Pes de l'equip amb aigua

11.2.1 Tub intern

$$V_{i,aigua} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{it}^2 \cdot L_{total} = 8,82 \cdot 10^{-3} \text{m}^3$$

V_{aigua} : volum que ocupa l'aigua que circula pel tub interior (m³)

$$P_{i,aigua} = P_{i,buit} + V_{i,aigua} \cdot \rho_{aigua} = 66,28\text{kg}$$

11.2.2 Anell extern

$$V_{e,aigua} = \frac{\pi}{4} \cdot (D_{eT}^2 - D_{iT}^2) \cdot L_{total} = 7,05 \cdot 10^{-4} \text{m}^3$$

V_{aigua} : volum que ocupa l'aigua que circula per l'anell extern (m³)

$$P_{e,aigua} = P_{e,buit} + V_{e,aigua} \cdot \rho_{aigua} = 96,98\text{kg}$$

11.2.3 Total

$$P_{aigua} = P_{i,aigua} + P_{e,aigua} = 163,26\text{kg}$$

11.3 Pes de l'equip en operació

El procediment és el mateix, però enlloc d'utilitzar la densitat de l'aigua en el cas del tub interior, posar la densitat de la mescla. El resultat és el següent:

$$P_{operació} = P_{i,operació} + P_{e,aigua} = 67,16 + 96,98 = 164,15\text{kg}$$

11.5 DISSENY DELS COLUMNES DE DESTIL·LACIÓ

11.5.1 Mètode Short-Cut

Per realitzar el disseny s'ha escollit el mètode "Short-Cut".

Es considera que els cabals molars dels corrents de vapor i líquid es mantenen constants a cada un dels sectors de la columna, el que fa innecessari els balanços entàlpics. S'adoptarà el mètode d'iteració per al desenvolupament dels successius tempteigs:

- Es comença obtenint els valors de les variables d'estat (pressuposant condicions de convergència).
- Es suposarà que tots els components de la barreja/mescla es distribueixen sobre els corrents destil·lat i residu.

Es determinen les variables d'estat, temperatura i composició de tots els corrents que entren i surten dels diferents pisos, pel càlcul esglaonat d'un a l'altre.

Els càlculs es desenvoluparan tant des del condensador cap a baix, fins a assolir el pis d'alimentació, com des de la caldera cap a dalt, fins a arribar al mateix pis, utilitzant alternativament les relacions d'equilibri i els balanços de matèria.

Primerament, es fa una distribució dels cabals i concentracions desitjades, que junt amb les volatilitats relatives permetran calcular el nombre d'etapes necessàries.

11.5.2 Disseny funcional i mecànic de la columna C-401a

Balanços de matèria

- **Global**

$$F = B + D$$

- **Components**

$$Fx_F = Bx_B + Dx_D$$

On:

F : Cabal d'aliment Kg/h

D : Cabal de destil·lat Kg/h

B : Cabal de cues Kg/h

x_i : Fracció màssica del corrent i

CABAL (Kg/h)	F _i	D _i	B _i
PNP	219,64	0,00	219,64
ONP	56,92	0,00	56,92
diNP	24,63	0,00	24,63
diazo	32,83	0,00	32,83
H ₂ O	6540,99	5886,89	654,10
HNO ₃	588,02	529,22	58,80
fenol	31,10	0,00	31,10
CABAL TOTAL	7494,13	6416,11	1078,02

Fraccions massiques	X _f	X _d	X _b
PNP	0,0293	0,0000	0,0293
ONP	0,0076	0,0000	0,0076
diNP	0,0033	0,0000	0,0033
diazo	0,0044	0,0000	0,0044
H ₂ O	0,8728	0,7855	0,0873
HNO ₃	0,0785	0,0706	0,0078
Fenol	0,0041	0,0000	0,0041

Volatilitat	PNP	ONP	diNP	diazo	H ₂ O	HNO ₃	Fenol
PNP		0,148	2,628	3,35	0,657	0,677	0,887
ONP	2,700		0,388	0,49	0,097	0,100	0,131
diNP	2,628	0,388		1,27	0,250	0,258	0,338
diazo	3,345	0,494	0,785		0,196	0,202	0,265
H ₂ O	0,657	0,097	4,003	5,10		1,031	1,352
HNO ₃	0,677	0,100	3,882	4,94	0,970		1,311
Fenol	0,887	0,131	2,961	3,77	0,740	0,763	

Mètode del "Short-Cut"

Es realitzarà el càlcul dels següents paràmetres:

1. El nombre d'etapes mínima
2. La relació de reflux mínima
3. El nombre d'etapes reals
4. L'etapa de l'aliment

1. Nombre mínim d'etapes

Aplicable sempre que es verifiqui que la barreja binària té un comportament de barreja ideal i considerem una volatilitat mitja per a tota la columna s'utilitza l'equació de Fenske.

$$N_{\min} \cong \frac{\ln \left[\left(\frac{(x_A/x_B)_D}{(x_A/x_B)_B} \right) \right]}{\ln(\alpha_{AB})} = \frac{\ln \left[\left(\frac{0,785/0,0873}{4 \cdot 10^{-7}/0,0044} \right) \right]}{\ln(3,34)} = 8,85 \cong 9$$

Per trobar el $(N_{\min})_{rec}$ s'utilitza la mateixa equació però on hi ha la relació del destil·lat es posa la mateixa relació però referida a l'aliment.

N	Nº etapes
N_{\min}	9
$(N_{\min})_{rect}$	7

2. Relació de Reflux mínima

Mètode de Underwood:

Es considera que:

- ✓ L i V constants en cada sector de la columna.
- ✓ Volatilitats relatives constants per a tota la columna, de tots els components de l'aliment respecte a un d'ells, pres com referència, a la temperatura mitja de la columna.

S'utilitzarà l'equació d'Underwood: $V_{\min} \cong \sum_{i=1}^n \left(\frac{\alpha_i D x_{i,D}}{\alpha_i - \phi} \right)$

On: α_i : Volatilitat del compost i

D : Cabal de destil·lat en Kg/h

$x_{i,D}$: Fracció massica del líquid

V_{\min} : Cabal de vapor mínim en Kg/h

Com que ϕ_i no es sap i s'ha d'iterar, s'ha utilitzat l'eina Solver de l'Excel obtenint el següent resultat:

f_i	$V_{\min} (Kg/h)$
0,6607	21738,62

A continuació es divideix el cabal de vapor mínim pel cabal de destil·lat:

$$\frac{V_{\min}}{D} = \left(\frac{L}{D} \right)_{\min} + 1$$

Un cop tenim $\left(\frac{L}{D} \right)_{\min}$ es calcula $\left(\frac{L}{D} \right)$ com:

$$\left(\frac{L}{D} \right) \cong 1,5 \left(\frac{L}{D} \right)_{\min} \rightarrow \text{El 1,5 és fixat per nosaltres degut a les necessitats de disseny.}$$

V_{\min}/D	$(L/D)_{\min}$	L/D_{disseny}	
3,388	2,388	1,5	3,58

3. Nombre d'etapes reals

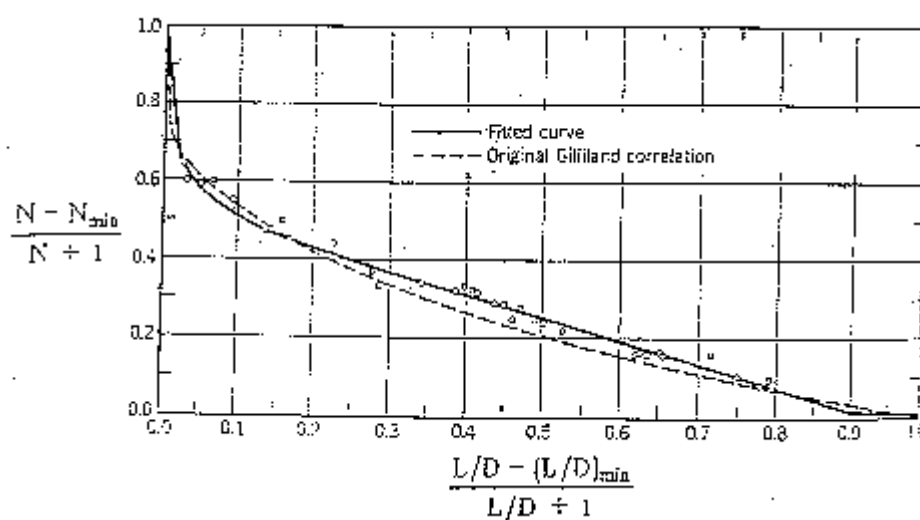
Suposant raons de reflux constant en els dos sectors de la columna, Gilliland relaciona:

$$\frac{N - N_{\min}}{N + 1} \quad \text{front} \quad \frac{L/D - (L/D)_{\min}}{L/D + 1}$$

Primerament es calcula x:

$$x = \frac{L/D - (L/D)_{\min}}{L/D + 1} = \frac{3,58 - 2,388}{3,58 + 1} = 0,46$$

Seguidament, depenent del valor de x s'utilitzaran les següents correlacions:



$$\frac{N - N_{\min}}{N + 1} = 1,0 - 18,5715x \Rightarrow 0 \leq x \leq 0,01$$

$$\frac{N - N_{\min}}{N + 1} = 0,545827 - 0,591422x + \frac{0,002743}{x} \Rightarrow 0,01 \leq x \leq 0,9$$

$$\frac{N - N_{\min}}{N + 1} = 0,16595 - 0,165955x \Rightarrow 0,9 \leq x \leq 1$$

x	0,46		
x	(N-N_{min})/(N+1)	N	N_{aliment}
0 < x < 0,01	-7,5879	0	0
0,01 < x < 0,9	0,2784	13	10
0,9 < x < 1	0,0892	10	8

Per tant el número de plats és 13 i el de l'aliment és el 10.

4. Plat de l'aliment

Un cop trobat el nombre d'etapes reals es calcula a quina etapa real entra l'aliment:

$$(N_{\min})_{rect} \cong \frac{\ln \left[\left(\frac{(x_A/x_b)_D}{(z_a/z_b)} \right) \right]}{\ln(\alpha_{AB})} \Rightarrow \frac{(N_{\min})_{rect}}{N_{\min}} = \frac{N_{rect}}{N} \Rightarrow N_{rect} = \frac{(N_{\min})_{rect}}{N_{\min}} N = \frac{7}{9} 13 = 10$$

Balanços d'energia

- **Al condensador** → es busca el calor intercanviat per poder fer el disseny del condensador.

Primer es troben les condicions de treball → Determinar la temperatura de condensació de la mescla i després resoldre balanç d'energia.

$$V = L + D$$

$$H_v V = L h_D + D h_D + Q_{Cond}$$

$$Q_{Cond} = V(H_v - h_D)$$

$$H_v = \sum H_i y_{i,D}$$

$$h_D = \sum h_{D,i} x_{i,D}$$

On: V : Cabal de vapor en Kg/h

L : Cabal de líquid en Kg/h

D : Cabal de destil·lat en Kg/h

H_v :Entalpia del vapor en KJ/h

h_D : Entalpia del líquid en KJ/h

$y_{i,D}$: Fracció màssica del vapor

$x_{i,D}$: Fracció màssica del líquid

	Compost	Coeficients Equació d'Antoine		
		a	b	c
1	PNP	15,175	3948,8	-44,563
2	ONP	14,035	4103,5	-72,798
3	diNP	13,266	4242,4	-27,181
4	diazo	12,697	4041	-32,25
5	H₂O	16,915	3054,8	-58,97
6	HNO₃	18,304	3816	-46,13
7	Fenol	17,292	4028	-76,701

T	T (°K)	pv1	pv2	pv3	pv4	pv5	pv6	pv7
105	378,14	28,142	1,815	3,248	2,757	1546,771	907,207	50,878
106	379,14	29,155	1,896	3,361	2,851	1593,708	939,065	53,176
107	380,14	30,199	1,981	3,478	2,948	1641,764	971,841	55,562
108	381,14	31,273	2,068	3,598	3,048	1690,956	1005,555	58,038
109	382,14	32,379	2,159	3,722	3,151	1741,305	1040,228	60,608
110	383,14	33,518	2,254	3,849	3,256	1792,828	1075,880	63,273
111	384,14	34,689	2,351	3,980	3,365	1845,544	1112,531	66,037
112	385,14	35,894	2,453	4,114	3,476	1899,473	1150,204	68,902
113	386,14	37,133	2,558	4,252	3,590	1954,634	1188,920	71,873
114	387,14	38,407	2,666	4,394	3,708	2011,045	1228,700	74,950
115	388,14	39,718	2,779	4,540	3,828	2068,727	1269,567	78,139
116	389,14	41,065	2,896	4,690	3,952	2127,699	1311,543	81,441
117	390,14	42,449	3,017	4,843	4,079	2187,981	1354,651	84,861

K1	K2	K3	K4	K5	K6	K7	$\Sigma K_i/X_i$
0,0185	0,0012	0,0021	0,0018	1,0176	0,5968	0,0335	0,8415
0,0192	0,0012	0,0022	0,0019	1,0485	0,6178	0,0350	0,8673
0,0199	0,0013	0,0023	0,0019	1,0801	0,6394	0,0366	0,8936
0,0206	0,0014	0,0024	0,0020	1,1125	0,6615	0,0382	0,9206
0,0213	0,0014	0,0024	0,0021	1,1456	0,6844	0,0399	0,9482
0,0221	0,0015	0,0025	0,0021	1,1795	0,7078	0,0416	0,9765
0,0228	0,0015	0,0026	0,0022	1,2142	0,7319	0,0434	1,0055

0,0236	0,0016	0,0027	0,0023	1,2497	0,7567	0,0453	1,0351
0,0244	0,0017	0,0028	0,0024	1,2859	0,7822	0,0473	1,0654
0,0253	0,0018	0,0029	0,0024	1,3231	0,8084	0,0493	1,0964
0,0261	0,0018	0,0030	0,0025	1,3610	0,8352	0,0514	1,1281
0,0270	0,0019	0,0031	0,0026	1,3998	0,8629	0,0536	1,1605
0,0279	0,0020	0,0032	0,0027	1,4395	0,8912	0,0558	1,1937

Quan el sumatori sigui igual a 1 , aquesta és la temperatura a la que es produeix la condensació (T=111°C).

Per calcular les entalpies s'utilitzarà una correlació per calcular les capacitats calorífiques a la temperatura de condensació.

- **Correlació pel vapor**

$$Cp_i^V = Cp_A + Cp_B T + Cp_C T^2 + Cp_D T^3 + Cp_E T^4 + Cp_F T^5$$

- **Correlació pel líquid**

$$Cp_i^L = Cpl_A + Cpl_B T + Cpl_C T^2 + Cpl_D T^3 + Cpl_E T^4 + Cpl_F T^5$$

Compostos	Cp _a	Cp _b	Cp _c	Cp _d	Cp _e	Cp _f	Cp _v (KJ/Kg.°K)
PNP	7,90E+00	-1,08E-02	2,75E-04	-4,30E-07	2,60E-10	-2,50E-18	7,06E-04
ONP	7,90E+00	-1,08E-02	2,75E-04	-4,30E-07	2,60E-10	-2,50E-18	7,06E-04
diNP	3,20E+00	-1,77E-06	6,42E-09	-1,08E-11	8,50E-15	-6,00E-14	6,48E-05
diazo	3,20E+00	-1,77E-06	6,42E-09	-1,08E-11	8,50E-15	-6,00E-14	6,48E-05
H ₂ O	8,00E+00	-6,80E-04	2,80E-06	1,90E-09	-3,04E-12	0,00E+00	1,89E-03
HNO ₃	4,20E+00	3,42E-02	-1,70E-05	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	9,39E-04
Fenol	2,70E+00	7,10E-02	5,93E-05	-1,60E-07	1,20E-12	-1,30E-14	1,27E-03

Compostos	Cpl _a	Cpl _b	Cpl _c	Cpl _d	Cpl _e	Cpl _f	Cp _L (KJ/Kg.°K)
PNP	1,08E+05	-3,30E+02	4,24E+02	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	1,59E+03
ONP	1,08E+05	-3,30E+02	4,24E+02	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	1,59E+03
diNP	8,60E+04	-3,25E+01	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	1,68E+00
diazo	8,60E+04	-3,25E+01	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	1,68E+00
H ₂ O	5,62E+04	2,40E+02	-8,50E-01	1,00E-03	0,00E+00	0,00E+00	1,83E+01
HNO ₃	1,31E+05	-1,22E+02	1,70E-01	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	7,24E+00
Fenol	1,01E+05	3,17E+02	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	9,60E+00

Un cop es tenen les capacitats calorífiques es calculen les entalpies segon les equacions següents:

$$H_v = \sum H_i y_{i,D} \quad H_i = Cp_i^V (T_s - T_E)$$

$$h_D = \sum h_{D,i} x_{i,D} \quad h_{Di} = Cp_i^L (T_s - T_E)$$

Compostos	D _i (Kg/h)	X _{d,i}	K _i	y _i	h _D (KJ/h)	H _v (KJ/h)
PNP	0,00E+00	2,93E-05	2,12E-02	6,22E-07	-1,44E+00	1,36E-08
ONP	0,00E+00	7,60E-06	1,19E-03	9,06E-09	-3,74E-01	1,98E-10
diNP	0,00E+00	3,29E-06	2,49E-03	8,19E-09	-1,71E-04	1,65E-11
diazo	0,00E+00	4,38E-06	2,14E-03	9,36E-09	-2,29E-04	1,88E-11
H ₂ O	5,89E+03	7,86E-01	1,27E+00	9,97E-01	-4,47E+02	5,85E-02
HNO ₃	5,29E+02	7,06E-02	6,93E-01	4,89E-02	-1,58E+01	1,42E-03
fenol	0,00E+00	4,15E-06	3,33E-02	1,38E-07	-1,23E-03	5,43E-09

Es realitza la suma de les entalpies del vapor i del líquid i, finalment el calor intercanviat es calcula com:

$$Q_{Cond} = V(H_v - h_D) = 827,69 \text{ KJ / s}$$

Un cop es té el calor intercanviat es dissenya el condensador mitjançant el mètode Kern. Aquest calor es el calor de disseny pel condensador E-403a.

- **Al Reboiler** → es realitza el mateix procediment que al condensador però el balanç canvia i es busca la temperatura d'ebullició de la mescla.

Seguidament es calcula l'entalpia de l'aliment com:

$$h_F = \frac{\sum L \cdot h_{D,i} x_{i,D} + \sum V \cdot H_{v,i} y_{i,D}}{F}$$

On:

F : Cabal d'aliment en Kg / h

L : Cabal de líquid en Kg / h

D : Cabal de destil·lat en Kg / h

H_v : Entalpia del vapor en KJ / h

h_D : Entalpia del líquid en KJ / h

$y_{i,D}$: Fracció màssica del vapor

$x_{i,D}$: Fracció màssica del líquid

h_F : Entalpia de l'aliment en KJ / h

Finalment, el calor bescanviat al reboiler serà:

$$Q_{Reboiler} = B h_B + D h_D + Q_{Cond} - F h_F$$

On:

F : Cabal d'aliment en Kg / h

B : Cabal de líquid de cues en Kg / h

D : Cabal de destil·lat en Kg / h

h_B : Entalpia del líquid a cues en KJ/h

h_D : Entalpia del líquid destil·lat en KJ/h

h_F : Entalpia de l'aliment en KJ/h

Q_{Cond} : Calor bescanviat al condensador en KJ/h

Q_{reb} : Calor bescanviat al reboiler en KJ/h

T	T (°K)	pv1	pv2	pv3	pv4	pv5	pv6	pv7
150	4,73E+02	3,88E+02	4,40E+01	4,26E+01	3,42E+01	1,39E+04	1,17E+04	1,25E+03
145	4,68E+02	3,48E+02	3,87E+01	3,83E+01	3,08E+01	1,27E+04	1,05E+04	1,10E+03
140	4,63E+02	3,11E+02	3,39E+01	3,43E+01	2,76E+01	1,16E+04	9,44E+03	9,62E+02
135	4,58E+02	2,78E+02	2,95E+01	3,06E+01	2,47E+01	1,05E+04	8,45E+03	8,39E+02
130	4,53E+02	2,47E+02	2,57E+01	2,73E+01	2,21E+01	9,56E+03	7,54E+03	7,29E+02
125	4,48E+02	2,19E+02	2,22E+01	2,42E+01	1,97E+01	8,65E+03	6,71E+03	6,31E+02
120	4,43E+02	1,94E+02	1,92E+01	2,15E+01	1,75E+01	7,81E+03	5,96E+03	5,44E+02
115	4,38E+02	1,71E+02	1,65E+01	1,90E+01	1,55E+01	7,03E+03	5,27E+03	4,68E+02
110	4,33E+02	1,50E+02	1,41E+01	1,67E+01	1,37E+01	6,32E+03	4,65E+03	4,00E+02
105	4,28E+02	1,32E+02	1,20E+01	1,47E+01	1,21E+01	5,65E+03	4,08E+03	3,41E+02
100	4,23E+02	1,15E+02	1,02E+01	1,28E+01	1,06E+01	5,05E+03	3,58E+03	2,89E+02
95	4,18E+02	1,00E+02	8,61E+00	1,12E+01	9,25E+00	4,49E+03	3,12E+03	2,43E+02
90	4,13E+02	8,66E+01	7,23E+00	9,72E+00	8,07E+00	3,98E+03	2,71E+03	2,04E+02

K1	k2	k3	k4	k5	k6	k7	$\Sigma K_i X_i$
0,511	0,058	0,056	0,045	18,283	15,396	1,646	1,739
0,458	0,051	0,050	0,040	16,707	13,849	1,445	1,587
0,410	0,045	0,045	0,036	15,233	12,426	1,265	1,445
0,366	0,039	0,040	0,033	13,857	11,120	1,104	1,313
0,325	0,034	0,036	0,029	12,575	9,924	0,959	1,189
0,289	0,029	0,032	0,026	11,383	8,832	0,831	1,075
0,255	0,025	0,028	0,023	10,278	7,837	0,716	0,969
0,225	0,022	0,025	0,020	9,255	6,933	0,615	0,872
0,198	0,019	0,022	0,018	8,310	6,113	0,526	0,782
0,173	0,016	0,019	0,016	7,440	5,373	0,448	0,699
0,151	0,013	0,017	0,014	6,641	4,706	0,380	0,623
0,132	0,011	0,015	0,012	5,909	4,108	0,320	0,553
0,114	0,010	0,013	0,011	5,241	3,572	0,269	0,490

La temperatura a la que la mezcla comienza a bullir és a 125°C, i es calculen les entalpies a aquesta temperatura:

Compostos	B_i (Kg/h)	X_{d_i}	K_i	y_i	h_{L_i} (KJ/h)	H_{v_i} (KJ/h)
PNP	2,20E+02	2,93E-02	2,12E-02	6,21E-04	4,59E+03	3,41E-05
ONP	5,69E+01	7,59E-03	1,19E-03	9,05E-06	1,19E+03	4,96E-07
diNP	2,46E+01	3,28E-03	2,49E-03	8,18E-06	3,17E-01	2,28E-08
diazo	3,28E+01	4,38E-03	2,14E-03	9,35E-06	4,23E-01	2,60E-08
H ₂ O	6,54E+02	8,73E-02	1,27E+00	1,11E-01	1,01E+02	1,28E-02
HNO ₃	5,88E+01	7,85E-03	6,93E-01	5,44E-03	3,46E+00	3,51E-04
Fenol	3,11E+01	4,15E-03	3,33E-02	1,38E-04	2,39E+00	1,05E-05

$$h_F = \frac{\sum L \cdot h_{D,i} x_{i,D} + \sum V \cdot H_{V,i} y_{i,D}}{F} = 5,016 \text{ KJ / s}$$

$$Q_{\text{Reboiler}} = B h_B + D h_D + Q_{\text{Cond}} \quad F h_F = 38424 \text{ KJ / s}$$

Un cop es té el calor intercanviat es dissenya el reboiler mitjançant el mètode Kern. Aquest calor és el que s'utilitza per fer el disseny del reboiler E-404a.

Disseny mecànic de la columna

El disseny mecànic es basa en trobar el diàmetre de la columna en funció del % d'inundació de la columna.

Com depèn de molts paràmetres s'han escollit els més representatius

- Velocitat lliure del gas (m/s): $V_{SG} \equiv K \sqrt{\frac{\rho_l - \rho_g}{\rho_g}}$
- Distància entre plats (m): estudi de l'efecte en la columna en un rang de 0,15 a 0,9 metres.
 $K \equiv -0,052 + 0,33T - 0,28T^2$
- % de inundació: 75%, oscil·la entre el 65%-85%
- Velocitat de inundació (m/s): $u_r = (0,75 - 0,85)V_{SG} \rightarrow u_r = 0,8V_{SG}$

$$D_{\text{columna}} = \sqrt{\frac{4Q^{gas}}{u_r \rho_v 0,9\pi}}$$

- Diàmetre (m):
- Àrea neta disponible (m²): $A_n = Q^{gas} / u_r$
- Àrea de columna (m²): $A_{\text{columna}} = A_n / 0,9$
- Àrea del Downcomer (m²): $A_d \approx 10 - 12\% A_{\text{columna}} \rightarrow 10\%$.
- Àrea activa (m²): $A_a = A_c - 2A_d$
- Àrea ocupada pels forats (m²): $A_h \approx (7 - 16)\% A_a \rightarrow A_h \approx 10\% A_a$
- Pitch triangular i diàmetre dels forats: $l_p = 15 \text{ mm}$, $D_h = 5 \text{ mm}$.
- Àrea perforable (m²): $A_p = \frac{A_h}{0,9 \left(\frac{D_h}{l_p} \right)^2}$
- Altura del downcomer (m): $h_w = 40 - 90 \text{ mm}$,
- Longitud (m): $l_w = (0,65 - 0,85) D_c \rightarrow 60 \text{ mm}$ com òptim i $0,7 D_c$ respectivament.

- Velocitat de gotes(m/s): $u_w = \frac{K_2 - 0,9 \cdot (25,4 - D_h)}{(\rho_v)^{1/2}}$
- Pèrdua de càrrega en cada plat (Pa): $\Delta P = h_i 10^{-3} \cdot 9,8 \rho_L$

S'ha escollit la distància entre plats de 0,5metres ja que ens permet les millors condicions d'operació.

Distància entre plats (m)	Velocitat inundació (m/s)	Diàmetre (m)	A (m ²)	V _{goteig} (m/s)	V _{operació} (m/s)	DP (N/m ²)
0,500	0,074	1,287	123,238	0,742	3,627	0,576
0,600	0,078	1,255	117,239	0,757	3,812	0,589
0,700	0,072	1,305	126,776	0,742	3,525	0,569
0,800	0,057	1,474	161,562	0,598	2,766	0,512
0,900	0,032	1,978	291,166	0,598	1,535	0,406
0,450	0,069	1,338	133,146	0,742	3,357	0,556
0,300	0,038	1,807	243,084	0,887	1,839	0,435
0,350	0,051	1,562	181,480	1,031	2,463	0,488
0,250	0,023	2,341	407,633	1,175	1,096	0,361
0,200	0,005	5,043	1892,580	1,320	0,236	0,232
0,150	-0,015	-	-602,185	1,464	-0,742	-

11.5.3. Disseny funcional de la columna de destil·lació C-401b

El procediment per fer el disseny d'aquesta columna és exactament igual que la columna C-401a, amb la diferència que hi ha una sortida lateral i que s'utilitzaran 2 condensadors. Un treballarà a reflux amb la columna, retornarà àcid acètic i aigua, i l'altre és un condensador total que condensarà l'èter isopropílic.

Balanços de matèria

- **Global**

$$F = B + D$$

- **Components**

$$F x_F = B x_B + D x_D$$

CABAL (Kg/h)	F _i	D _i	B _i
PNP	0,803	0,000	0,803
Àcid acètic glacial	2658,716	1858,716	800,000
Èter isopropílic	9700,000	9699,999	0,000010
APAP	189,536	0,000	189,536
Aigua	62,525	50,289	12,236
CABAL TOTAL	7484,46	11603,568	1002,38

Fraccions massiques	X _f	X _d	X _b
PNP	0,0001	0,0000	0,0008
Àcid acètic glacial	0,2108	0,1601	0,7979
Èter isopropílic	0,7691	0,8356	0,0000
APAP	0,0150	0,0000	0,1890
Aigua	0,0050	0,0043	0,0122

Volatilitats	PNP	Àcid acètic glacial	Èter isopropílic	APAP	Aigua
PNP		1,41	0,67	3,35	1,48
Àcid acètic glacial	2,70		0,95	4,72	1,05
Èter isopropílic	0,67	0,95		4,97	0,99
APAP	3,35	4,72	0,20		4,94
Aigua	0,68	0,95	0,99	4,94	

1. El nombre d'etapes mínima

Aplicable sempre que es verifiqui que la barreja binària té un comportament de barreja ideal i considerem una volatilitat mitja per a tota la columna. S'utilitza l'equació de Fenske.

$$N_{\min} \cong \frac{\ln \left[\frac{(x_A/x_b)_D}{(x_A/x_b)_B} \right]}{\ln(\alpha_{AB})} = \frac{\ln \left[\frac{0,8356/0,1601}{1 \cdot 10^{-5}/0,797} \right]}{\ln(0,2)} = 23,95 \cong 24$$

Per trobar el $(N_{\min})_{\text{rec}}$ s'utilitza la mateixa equació però on hi ha la relació del destil·lat es posa la mateixa relació però referida a l'aliment.

N	Nº etapes
N _{min}	24
(N _{min}) _{rect}	15

2. Relació de reflux mínima

- **Mètode de Underwood:**

- L i V constants en cada sector de la columna.
- Volatilitats relatives constants per a tota la columna, de tots els components de l'aliment respecte a un d'ells, pres com referència, a la temperatura mitja de la columna.

S'utilitzarà l'equació d'Underwood $V_{\min} \cong \sum_{i=1}^n \left(\frac{\alpha_i D x_{i,D}}{\alpha_i - \phi} \right)$

Com que α_i no es sap i s'ha d'iterar, s'ha utilitzat l'eina Solver de l'Excel obtenint el següent resultat:

fi	V _{min} (Kg/h)
0,9200	184583

Seguidament es divideix el cabal de vapor mínim pel cabal de destil·lat:

$$\frac{V_{\min}}{D} = \left(\frac{L}{D} \right)_{\min} + 1$$

Un cop tenim $\left(\frac{L}{D} \right)_{\min}$ es calcula $\left(\frac{L}{D} \right)$ com:

$$\left(\frac{L}{D} \right) \cong 1,5 \left(\frac{L}{D} \right)_{\min} \rightarrow \text{El 1,5 es fixat per nosaltres degut a les necessitats de disseny.}$$

V _{min} /D	(L/D) _{min}	L/D _{disseny}	
15,900	14,900	3,5	52,15

3. Nombre d'etapes reals

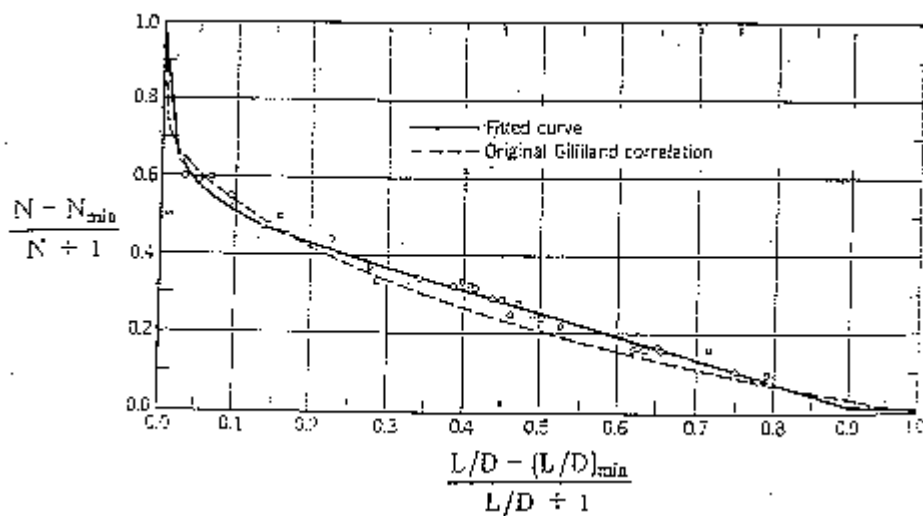
Suposant raons de reflux constant en els dos sectors de la columna, Gilliland relaciona:

$$\frac{N - N_{\min}}{N + 1} \text{ front } \frac{L/D - (L/D)_{\min}}{L/D + 1}$$

Primerament es calcula x:

$$x = \frac{L/D - (L/D)_{\min}}{L/D + 1} = \frac{0,6306 - 15,3}{15,3 + 1} = 0,73$$

Seguidament, depenent del valor de x s'utilitzaran les següents correlacions:



$$\frac{N - N_{\min}}{N + 1} = 1,0 - 18,5715x \Rightarrow 0 \leq x \leq 0,01$$

$$\frac{N - N_{\min}}{N + 1} = 0,545827 - 0,591422x + \frac{0,002743}{x} \Rightarrow 0,01 \leq x \leq 0,9$$

$$\frac{N - N_{\min}}{N + 1} = 0,16595 - 0,165955x \Rightarrow 0,9 \leq x \leq 1$$

x	0,73		
x	(N-N_{min})/(N+1)	N	N_{aliment}
0 < x < 0,01	-12,5247	1	0
0,01 < x < 0,9	0,1191	29	15
0,9 < x < 1	0,0451	27	14

Per tant el número de plats és 24 i el de l'aliment és el nombre 12.

Balanços d'energia

- **Al condensador** → es busca el calor intercanviat per poder fer el disseny del condensador. Igual que al condensador anterior. Es troba que la temperatura de condensació és de 95°C.

$$V = L + D$$

$$H_v V = Lh_D + Dh_D + Q_{Cond}$$

$$H_v = \sum H_i y_{i,D}$$

$$h_D = \sum h_{D,i} x_{i,D}$$

Compostos	Cp _a	Cp _b	Cp _c	Cp _d	Cp _e	Cp _f	Cp _v (KJ/Kg°K)
PNP	7,70E+00	1,30E-02	9,06E-05	-1,45E-07	8,90E-11	-1,97E-14	5,55E-04
Àcid acètic glacial	7,70E+00	1,30E-02	9,06E-05	-1,45E-07	8,90E-11	-1,97E-14	5,55E-04
Èter isopropílic	5,00E+00	1,28E-01	-6,03E+03	9,90E-09	0,00E+00	0,00E+00	-1,70E+04
APAP	5,00E+00	1,28E-01	-6,03E+03	9,90E-09	0,00E+00	0,00E+00	-1,70E+04
Aigua	8,00E+00	-6,80E-04	2,80E-06	1,90E-09	-3,04E-12	0,00E+00	1,89E-03

Compostos	Cpl _a	Cpl _b	Cpl _c	Cpl _d	Cpl _e	Cpl _f	Cp _L (KJ/Kg°K)
PNP	5,00E+05	2,45E+02	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	5,30E-04
Àcid acètic glacial	5,00E+05	2,45E+02	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	5,30E-04
Èter isopropílic	1,27E+05	3,32E+02	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	1,24E-04
APAP	1,27E+05	3,32E+02	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	1,24E-04
Aigua	5,62E+04	2,40E+02	-8,50E-01	1,00E-03	0,00E+00	0,00E+00	4,26E-03

Compostos	D _i (Kg/h)	X _d _i	K _i	y _i	hL _i (KJ/h)	Hv _i (KJ/h)
PNP	0,00E+00	0,00E+00	6,73E-01	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
Àcid acètic glacial	1,96E+03	9,83E-01	9,48E-01	9,32E-01	-4,85E-07	4,82E-07
Èter isopropílic	0,00E+00	0,00E+00	1,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
APAP	0,00E+00	0,00E+00	2,01E-01	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
Aigua	3,48E+01	1,74E-02	9,93E-01	1,73E-02	-5,35E-07	2,36E-07

$$Q_{Cond} = V(H_v - h_D) = 4966349 KJ / s$$

- **Al Reboiler** → Mateix procediment que al condensador però el balanç canvia i la temperatura d'ebullició és de 121°C.

Compostos	Cpl _a	Cpl _b	Cpl _c	Cpl _d	Cpl _e	Cpl _f	Cp _L (Kj/Kg°K)
PNP	5,00E+05	2,45E+02	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	1,76E+01
Àcid acètic glacial	5,00E+05	2,45E+02	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	1,76E+01
Èter isopropílic	1,27E+05	3,32E+02	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	5,51E+00
APAP	1,27E+05	3,32E+02	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	5,51E+00
Aigua	5,62E+04	2,40E+02	-8,50E-01	1,00E-03	0,00E+00	0,00E+00	1,83E+01

Compostos	Cp _a	Cp _b	Cp _c	Cp _d	Cp _e	Cp _f	Cp _v (Kj/Kg°K)
PNP	7,70E+00	1,30E-02	9,06E-05	-1,45E-07	8,90E-11	-1,97E-14	1,85E+01
Àcid acètic glacial	7,70E+00	1,30E-02	9,06E-05	-1,45E-07	8,90E-11	-1,97E-14	1,85E+01
Èter isopropílic	5,00E+00	1,28E-01	-6,03E+03	9,90E-09	0,00E+00	0,00E+00	-7,51E+08
APAP	5,00E+00	1,28E-01	-6,03E+03	9,90E-09	0,00E+00	0,00E+00	-7,51E+08
Aigua	8,00E+00	-6,80E-04	2,80E-06	1,90E-09	-3,04E-12	0,00E+00	8,15E+00

Compostos	B _i (Kg/h)	X _{d_i}	K _i	y _i	hL _i (KJ/h)	Hv _i (KJ/h)
PNP	0,00E+00	8,05E-04	6,73E-01	5,41E-04	-2,22E-05	1,56E-05
Àcid acètic glacial	1,96E+03	9,83E-01	9,48E-01	9,32E-01	-2,71E-02	2,69E-02
Èter isopropílic	0,00E+00	0,00E+00	1,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
APAP	0,00E+00	1,89E-01	2,01E-01	3,80E-02	-1,22E-03	-3,35E+04
Aigua	3,48E+01	1,74E-02	9,93E-01	1,73E-02	-3,86E-03	1,70E-03

$$h_F = \frac{\sum L \cdot h_{D,i} x_{i,D} + \sum V \cdot H_{V,i} y_{i,D}}{F} = -90132 \text{ KJ} / s$$

$$Q_{\text{Reboiler}} = B h_B + D h_D + Q_{\text{Cond}} \quad F h_F = 186557 \text{ KJ} / s$$

Sortida lateral

Per realitzar la sortida lateral es suposa que tot el que es retorna a la columna és àcid acètic i aigua, es podria considerar una mescla binària alhora d'utilitzar les operatives entre el destil·lat i la sortida lateral.

- **Operatives:**

Destil·lat

$$V = L + D \quad Vy = Lx + Dx_D \rightarrow y = \frac{L}{V}x + \frac{D}{V}x_D$$

Sortida lateral

$$V' = L' + D + S \quad Vy' = L'x + Dx_D + Sx_S \rightarrow y = \frac{L'}{V'}x - \frac{Sx_S + Dx_D}{V'}$$

On:

V : Cabal de vapor en Kg/h

L : Cabal de líquid en Kg/h

D : Cabal de destil·lat en Kg/h

L' : Cabal de líquid abans de la sortida lateral en Kg/h

V' : Cabal de líquid abans de la sortida lateral en Kg/h

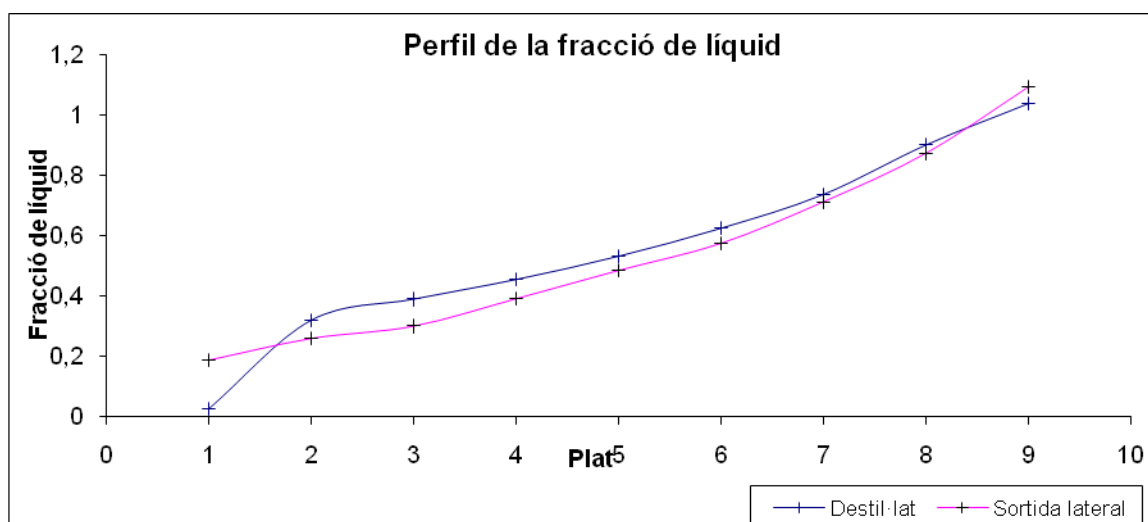
S : Cabal de la sortida lateral en Kg/h

x_D : Fracció massica del líquid al destil·lat

x_S : Fracció massica del líquid de la sortida lateral

Com que el compost que volem obtenir és l'àcid acètic al 98% els valors de les fraccions són en relació a l'acètic.

Plat	Operativa S	Operativa D
1	0,026	0,186
2	0,320	0,228
3	0,390	0,279
4	0,455	0,340
5	0,532	0,414
6	0,625	0,504
7	0,737	0,612
8	0,901	0,873
9	1,038	1,093



11.6. DISSENY DE LA COLUMNA D'ARROSSEGAMENT AMB VAPOR

11.6.1. Disseny funcional i mecànic de la columna C-402a

En la destil·lació per arrossegament de vapor d'aigua es duu a terme la vaporització selectiva del component volàtil d'una barreja formada per aquest i altres "no volàtils".

L'anterior s'assoleix per mitjà de la injecció de vapor d'aigua directament en el si de la barreja, anomenant aquest "vapor d'arrossegament", però en realitat la seva funció no és la de "arrossegar" el component volàtil, sinó condensar-se formant altra fase immiscible que cedirà la seva calor latent a la barreja a destil·lar per a assolir la seva evaporació.

La destil·lació per arrossegament amb vapor d'aigua, en sistemes de líquids immiscibles, és necessari establir que existeix una gran diferència entre una destil·lació per arrossegament i una simple, ja que en la primera no es presenta un equilibri de fases líquid-vapor entre els dos components a destil·lar com es dona en la destil·lació simple, per tant no és possible realitzar diagrames d'equilibri ja que en el vapor mai estarà present el component "no volàtil" mentre aquest destil·lant el volàtil.

En la destil·lació per arrossegament de vapor el destil·lat obtingut serà pur en relació al component no volàtil (encara que requereixi d'un decantació per a ser separat de l'aigua), cosa que no succeeix en la destil·lació simple on el destil·lat segueix presentant ambdós components encara que més enriquit en algun d'ells. A més si aquest tipus de barreges amb olis d'alt pes molecular fossin destil·lades sense l'addició del vapor es requeriria de gran quantitat d'energia per a escalfar-la i utilitzaria major temps, podent descompondre si es tracta d'un oli essencial.

El disseny de la columna d'arrossegament de vapor es realitzarà un balanç de matèria i mitjançant el mètode de "Short Cut", es determinar el nombre d'etapes necessàries per a les necessitats del procés.

Seguidament es realitzarà un balanç d'energia per poder trobar el calor necessari per dissenyar el condensador corresponent al cap de columna.

Aquesta columna al realitzar el "Short-Cut" es calcularà el $\left(\frac{L}{D}\right)$ per poder el nombre d'etapes, la

diferència és que no es retornarà líquid a la columna ja que tots els components arrossegats són per eliminar, i un cop calculades les necessitats de vapor ja es sabrà la quantitat de vapor mínima per poder dissenyar la columna.

Balanços de matèria

- **Global**

$$F = B + D$$

- **Components**

$$F x_F = B x_B + D x_D$$

Fraccions màssiques	X_f	X_d	X_b
PNP	0,4018	0,0000	0,9984
ONP	0,0740	0,1314	0,0000
diNP	0,0138	0,0245	0,0000
diazo	0,0164	0,0291	0,0000
Aigua	0,3915	0,6956	0,0016
HNO₃	0,0672	0,1195	0,0000
Tar	0,0199	0,0354	0,0000
Fenol	0,0155	0,0275	0,0000

CABAL (Kg/h)	F_i	D_i	B_i
PNP	806,67	0,01	806,66
ONP	148,50	148,50	0,00
diNP	27,67	27,67	0,00
diazo	32,83	32,83	0,00
Aigua	785,94	785,94	1,32
HNO₃	135,00	135,00	0,00
Tar	40,00	40,00	0,00
Fenol	31,10	31,10	0,00
CABAL TOTAL	2007,7087	1129,9501	807,9786

- **Necessitats de vapor**

$$Relació = \frac{P_{vapH_2O}}{P_{vapHidrocarbur}}$$

Un cop trobat la quantitat de vapor per cada hidrocarbur es troba les necessitats de vapor mínimes per cada compost, no es compte la quantitat pel PNP perquè aquest no s'arrossega al no formar ponts d'hidrogen amb l'aigua.

Necessitats de vapor	a	b	c	P _v	Relació	Vapor (Kg/h)
PNP	15,175	3948,800	-44,563	0,023	1,253	1011,026
ONP	14,035	4103,500	-72,798	0,018	1,682	249,743
diNP	13,266	4242,400	-27,181	0,017	1,692	46,823
díazo	12,697	4041,000	-32,250	0,017	1,774	58,249
Aigua	16,915	3054,800	-58,970	0,030	0,992	130,778
HNO₃	18,304	3816,000	-46,130	0,029	1,000	75,643
Tar	15,383	3890,643	-51,228	0,029	0,026	0,236
Fenol	17,292	4028,000	-76,701	0,026	1,139	35,421

$$\text{Vapor}(\text{Kg} / h) = 596,89 \text{Kg} / h$$

Ara ja es pot calcular el nombre d'etapes igual que la torre anterior.

N	Nº etapes
N_{min}	26
(N_{min})_{rect}	17

x	0,81		
x	(N-N_{min})/(N+1)	N	N_{aliment}
0<x<0,01	-14,1219	1	0
0,01<x<0,9	0,0678	28	18
0,9<x<1	0,0308	27	18

Obtenint 28 etapes reals i el plat de l'aliment és el 18.

Balanços d'energia

- **Al condensador** → es busca el calor intercanviat per poder fer el disseny del condensador. Igual que al condensador anterior.

$$V = L + D$$

$$H_v V = L h_D + D h_D + Q_{Cond}$$

$$H_v = \sum H_i y_{i,D}$$

$$h_D = \sum h_{D,i} x_{i,D}$$

Realitzant els mateixos càlculs que la torre anterior, la temperatura de condensació és de 140°C.

Compostos	Cp _a	Cp _b	Cp _c	Cp _d	Cp _e	Cp _f	Cp _v (Kj/Kg.°K)
PNP	7,90E+00	-1,08E-02	2,75E-04	-4,30E-07	2,60E-10	-2,50E-18	8,30E-04
ONP	7,90E+00	-1,08E-02	2,75E-04	-4,30E-07	2,60E-10	-2,50E-18	8,30E-04
diNP	3,20E+00	-1,77E-06	6,42E-09	-1,08E-11	8,50E-15	-6,00E-14	5,60E-05
diazo	3,20E+00	-1,77E-06	6,42E-09	-1,08E-11	8,50E-15	-6,00E-14	5,60E-05
Aigua	8,00E+00	-6,80E-04	2,80E-06	1,90E-09	-3,04E-12	0,00E+00	1,91E-03
HNO₃	4,20E+00	3,42E-02	-1,70E-05	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	1,02E-03
Tar	5,30E+00	1,18E-02	8,50E-05	-1,45E-07	7,40E-11	-1,90E-14	2,45E-04
Fenol	2,70E+00	7,10E-02	5,93E-05	-1,60E-07	1,20E-12	-1,30E-14	1,37E-03

Compostos	Cpl _a	Cpl _b	Cpl _c	Cpl _d	Cpl _e	Cpl _f	Cp _L (KJ/Kg.°K)
PNP	1,08E+05	-3,30E+02	4,24E+02	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	2,17E+03
ONP	1,08E+05	-3,30E+02	4,24E+02	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	2,17E+03
diNP	8,60E+04	-3,25E+01	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	1,64E+00
diazo	8,60E+04	-3,25E+01	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	1,64E+00
Aigua	5,62E+04	2,40E+02	-8,50E-01	1,00E-03	0,00E+00	0,00E+00	1,88E+01
HNO₃	1,31E+05	-1,22E+02	1,70E-01	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	7,27E+00
Tar	9,66E+04	-4,14E+01	1,21E+02	1,43E-04	0,00E+00	0,00E+00	3,10E+02
Fenol	1,01E+05	3,17E+02	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	1,03E+01

Compostos	D _i (Kg/h)	X _{d_i}	K _i	y _i	hL _i (KJ/h)	Hv _i (KJ/h)
PNP	8,07E-03	6,39E-05	2,47E-02	1,58E-06	2,77E+00	2,62E-08
ONP	1,49E+02	1,18E-01	1,45E-03	1,70E-04	5,11E+03	2,82E-06
diNP	2,77E+01	2,19E-02	2,89E-03	6,33E-05	7,18E-01	7,09E-08
diazo	3,28E+01	2,60E-02	2,47E-03	6,42E-05	8,52E-01	7,19E-08
AIGUA	7,27E+02	1,03E-01	1,45E+00	1,49E-01	3,88E+01	5,72E-03
HNO₃	7,56E+01	5,99E-02	8,05E-01	4,82E-02	8,71E+00	9,87E-04
Tar	8,98E+00	7,11E-03	5,75E-02	4,09E-04	4,41E+01	2,00E-06
Fenol	3,11E+01	2,46E-02	4,04E-02	9,94E-04	5,07E+00	2,71E-05

$$Q_{Cond} = V(H_v - h_D) = -1522,30 KJ / s$$

Un cop es té el calor intercanviat es dissenya el condensador mitjançant el mètode Kern. Aquest calor és el calor de disseny del condensador E-405a.

Disseny mecànic de la columna

Es realitza el mateix procediment que l'anterior columna i els resultats es presenten en la següent taula. S'ha escollit la distància entre plats de 0,25metres.

Distància entre plats (m)	Velocitat inundació (m/s)	Diàmetre (m)	A (m ²)	V _{goteig} (m/s)	V _{operació} (m/s)	DP (N/m ²)
0,15	-0,0152	-	-14,5830	1,0476	-0,7422	-
0,2	0,0048	0,8218	45,8324	1,0404	0,2361	0,1135
0,25	0,0225	0,3814	9,8716	1,0331	1,0964	0,2444
0,3	0,0378	0,2945	5,8867	1,1259	1,8386	0,3165
0,35	0,0506	0,2545	4,3949	1,1187	2,4627	0,3663
0,4	0,0610	0,2318	3,6458	1,2631	2,9687	0,4021
0,45	0,0689	0,2180	3,2244	1,4075	3,3567	0,4276
0,5	0,0745	0,2097	2,9844	1,5519	3,6266	0,4445
0,6	0,0783	0,2045	2,8392	1,6963	3,8121	0,4557
0,7	0,0724	0,2127	3,0701	1,8407	3,5254	0,4382
0,8	0,0568	0,2401	3,9125	1,9851	2,7663	0,3882
0,9	0,0315	0,3224	7,0511	2,1295	1,5350	0,2892

11.7. DISSENY DE L'EVAPORADOR

11.7.1. Disseny funcional i mecànic de l'evaporador

Per dissenyar l'evaporador es realitzarà un balanç de matèria i d'energia conjuntament per poder trobar l'àrea de disseny.

- **Balanç de matèria global**

$$l = V + L$$

- **Balanç de matèria de component**

$$lx_l = Lx_L$$

$$L = \frac{x_l}{x_L} l = \frac{0,082}{0,15} 6416,11 = 3528,1 \text{ Kgh}^{-1}$$

$$V = l - L = 6416,11 - 3528,11 = 2888,0 \text{ Kgh}^{-1}$$

Balanços d'energia

Es combinen aquestes tres equacions per trobar l'àrea d'intercanvi i el cabal de vapor d'entrada:

- **Balanç d'energia global**

$$Q = UA(T_s - T_E)$$

- **Balanç d'energia de component**

$$Q = \lambda_v W$$

$$Q = LH_L + VH_V - lH_l$$

Entalpies

- **Entalpies líquid concentrat**

Per al HNO_3 s'utilitzarà la correlació següent a la temperatura de 90°C . La capacitat calorífica de l'aigua es considera constant a $4,18 \text{ KJ/Kg}\cdot^\circ\text{K}$.

$$Cp_i^L = Cpl_A + Cpl_B T + Cpl_C T^2 + Cpl_D T^3 + Cpl_E T^4 + Cpl_F T^5$$

Compostos	Cpl _a	Cpl _b	Cpl _c	Cpl _d	Cpl _e	Cpl _f	Cp _L (KJ/Kg ^o K)
HNO ₃	1,31E+05	-1,22E+02	1,7E+02	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	7,27

$$H_L = H_L^{H_2O} + H_L^{HNO_3} = 3146,86 \text{ KJ/h}$$

- **Entalpia Aliment**

Entra a 80°C i la seva entalpia és:

$$H_l = H_l^{H_2O} + H_l^{HNO_3} = 2827,88 \text{ KJ/h}$$

- **Entalpia del vapor**

L'entalpia del vapor s'ha buscat al llibre "International Steam tables" i és:

$$H_V = 2717 \text{ KJ/h}$$

$$Q = LH_L + VH_V \quad LH_L = 15407382 \text{ KJ/h}$$

Un cop tenim el calor bescanviat, es busca el cabal de vapor d'entrada:

$$W = Q / \lambda_v = 15407382 / 2256,5 = 6854 \text{ Kg/h}$$

Per calcular l'àrea es necessita el coeficient global de transmissió de calor, per calcular-lo es considerarà:

- La transferència a través dels tubs
- La resistència del metall al passa de calor

Coeficient individual per tubs:

- Circulació turbulenta → Correlació Dittus-Boelter per escalfar/refredar fluids

$$Nu = 0,023 Re^{0,8} Pr^{0,4}$$

On:

$$Re \equiv \frac{V \rho D_i}{\mu} \quad Pr \equiv \frac{Cp \cdot \mu}{K} \quad Nu \equiv \frac{h \cdot D_i}{K}$$

Dades pel càlcul del Re i Pr

Diàmetre dels tubs (mm)=50

Gruix (mm)=2

Di (m)	μ (Kg/(mS))	ρ (Kg/m ³)	V (m/s)	K (W/ms)	Cp (JKg ⁰ K)
0,046	0,000012	2,343	4,690	0,022	1418,03704

Re	Pr
23442,52	0,78

$$Nu = \frac{hD}{K} = 0,023 Re^{0,8} Pr^{0,4} \Rightarrow h_t = \frac{K}{D} 0,023 Re^{0,8} Pr^{0,4} = 4430 \frac{W}{m^2 \circ K}$$

- Resistència del metall**

$$Deq = \left(\frac{D_{ext}^2 - D_i^2}{D_{ext} + D_i} \right) = \frac{50^2 - 46^2}{50 + 46} \cdot 10^{-3} = 0,004m$$

$$h_0 = \frac{h_t \left(\frac{D_{eq}}{D_i} \right)}{2K_m} = \frac{4430 \cdot 0,004 / 0,046}{2 \cdot 45,5} = 2,62 \frac{W}{m^2 \circ K}$$

$$1/U = \frac{1}{\frac{1}{h_t} + \frac{1}{h_0}} \Rightarrow U = 4430 \frac{W}{m^2 K}$$

- Àrea**

$$A = \frac{Q}{(T_s - T_E)U} = \frac{15407382}{4430 \cdot (160 - 80)} = 13m^2$$

$$\text{Àrea 1 tub} \rightarrow A_t = \pi L D_E = 3,1416 \cdot 2 \cdot (0,050) = 0,31415m^2$$

$$N^{\circ}Tubs = \frac{A}{A_t} = \frac{13}{0,31415} \approx 40$$

L (m)	Àrea (m ²)	Nº Tubs	D _b (m)	D _s (m)
2	0,314	40	1,5	1,7

11.8. DISSENY DE L'EXTRACCIÓ

11.8.1. Disseny funcional de l'equip d'extracció

El corrent líquid provinent de la centrifuga CT-401b, juntament amb el cabal de purga de la centrifuga CT-402b són tractats en un extractor multietapa en flux contracorrent.

L' objectiu es extreure l'àcid acètic el paracetamol i el PNP continguts en una solució aquosa, utilitzant com a solvent èter isopropílic.

Degut a la gran quantitat d'aliment a tractar i per motius de disseny, s'ha decidit dividir el corrent principal en dos corrents d'igual cabal (by-pass) i realitzar l'extracció en paral·lel.

En la taula següent es caracteritza el corrent de l'aliment que entra a cada extractor:

Cabal d'entrada (Kg/h)	Àcid acètic (% pes)	APAP (% pes)	PNP (% pes)	Aigua (% pes)
2811,11	48,25	3,37	0.022	48,358

Taula 11.8.1.a. Característiques corrent d'aliment

Es pot suposar que tot el paracetamol i la majoria del PNP queden retinguts en la fase organica ja que son immiscibles en aigua, per tant la resolució del disseny del extractor es realitzara tenint en compte una mescla ternaria (àcid acètic, aigua i eter isopropilic). Com l'àcid acètic es parcialment soluble en aigua, es fixe en un 98% la seva recuperació en l'extracte.

Per facilitar el contacte entre les dues fases i obtenir un millor rendiment de separació, l'operació es realitzara en flux contracorrent tal i com s'indica en el diagrama següent.

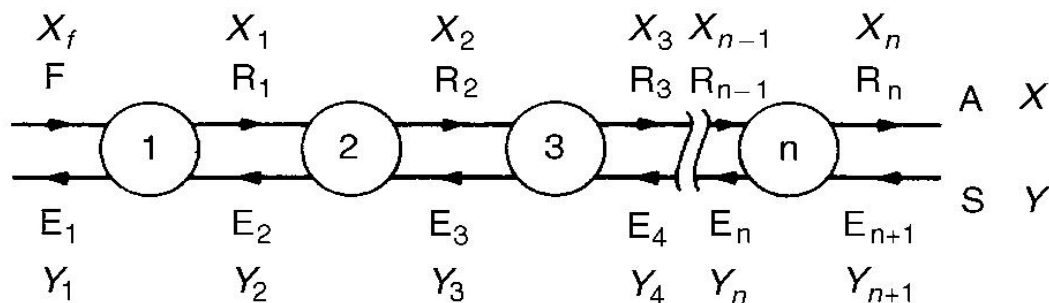


Figura 11.8.1.a. Esquema de l'extracció líquid - líquid en contracorrent

- **Característiques del solvent**

Per realitzar l'extracció s'utilitza l'èter isopropílic com a solvent, ja que les seves propietats són òptimes per la realització del procés.

- ✓ Inmiscibilitat en aigua: Bibliogràficament s'ha trobat que la solubilitat del èter isopropílic en aigua es de 0,2 gr de eter per cada 100 ml d'aigua en condicions normals (T=20°C i P=1atm).
- ✓ Alta volatilitat: Per realitzar seguidament una bona separació dels components de l'extracte mitjançant una destil·lació, es volia trobar un dissolvent amb una diferencia de volatilitat bastant significativa amb la resta de components (Teb = 69°C).
- ✓ Econòmicament viable: El preu del èter isopropílic, es bastant moderat la qual cosa ajuda a reduir costos de materies primeres.

- **Caracterització de cada corrent**

- ✓ Càlcul del èter isopropílic retingut en la fase aquosa

$$1359.24 \text{ L aigua} \cdot \frac{0.2 \text{ g èter isopropílic}}{0.1 \text{ l aigua}} = 2718 \text{ g èter isopropílic}$$

Dels 4850 Kg/h d'èter isopropílic introduïts com a solvent en l'extracte tan sols 2.72 kg/h queden retinguts en la fase aquosa, per tant es verifica numèricament la immiscibilitat de l'èter en aigua.

- ✓ Càlcul del PNP retingut en la fase aquosa

Es suposa que aproximadament un 30 % del PNP queda retingut en la fase aquosa.

$$\text{Cabal PNP refinat} = 0.3 \cdot \text{Cabal PNP entrada} = 0.2$$

- ✓ Càlcul dels cabals d'extracte i refinat

El cabal total de l'extracte correspon al 98% de l'àcid acètic que entra en l'aliment, tot el cabal de APAP, el 70% del cabal de PNP, el cabal de solvent de la fase orgànica, més una part de l'aigua que queda retinguda amb l'àcid:

$$\text{Extracte} = 0.98 \cdot \text{Àcid acètic} + \text{APAP} + 0.7 \cdot \text{PNP} + \text{Solvent} + \text{Aigua}$$

$$\text{Extracte} = 0.98 \cdot 1356.46 + 94.77 + 0.403 + 4847.3 + 31.26 = 6303,1 \text{ kg/h}$$

El cabal total que surt pel refinat correspon al 2% del cabal d'àcid acètic de l'aliment, més tot el cabal d'aigua (excepte el retingut per l'àcid acètic), més la part de solvent que queda diluït en la fase aquosa (calculada anteriorment).

$$\text{Refinat} = 0.02 \cdot \text{Àcid acètic} + \text{Aigua} + \text{Cabal solvent} + \text{Aigua} + 0.3 \cdot \text{Cabal PNP}$$

$$\text{Refinat} = 0.02 \cdot 1356.46 + 1327.98 + 2.72 + 0.2015 = 1358 \text{ kg/h}$$

Un cop calculats els cabals d'extracte i refinat, es determina la composició de cada component (% pes) en cada corrent, tan sols cal dividir el cabal màssic individual pel cabal total del corrent, els resultats es mostren a les taules 1.2 i 1.3.

Cabal extracte (Kg/h)	Àcid acètic (% pes)	APAP (% pes)	PNP (% pes)	Solvent (% pes)	Aigua (% pes)
6303,1	21,09	1,50	0,0064	76,91	0,496

Taula 11.8.1.b. Característiques de l'extracte en cada extractor

Cabal refinat (Kg/h)	Àcid acètic (% pes)	Aigua (% pes)	Solvent (% pes)	PNP (%pes)
1358	2	97,7852	0,2	0,0148

Taula 11.8.1.c. Característiques del refinat en cada extractor

- **Balanç de matèria a l'extractor**

Per tal de comprovar que tot el que entra surt de l'extractor apliquem un balanç de matèria global i per component a l'extractor.

Balanç de matèria global:

$$F + E_{n+1} = R_n + E_1$$

On:

F= Cabal aliment

E1 = Cabal extracte

E_{n+1} = Cabal solvent

R_n = Cabal refinat

$$2811,11 \text{ Kg/h} + 4850 \text{ Kg/h} = 6303,1 \text{ Kg/h} + 1358 \text{ Kg/h}$$

$$7661,1 \text{ Kg/h} = 7661,1 \text{ kg /h}$$

S'aprecia que es compleix el balanç de matèria global a l'extractor, per tant tot el que entra surt.

Balanç de matèria per component:

$$F \cdot x_a + E_{n+1} \cdot y_{a,n+1} = R_n \cdot x_{a,n} + E_1 \cdot y_{a,1}$$

On:

x_a = Fracció massica del component "a" a l'aliment.

$y_{a,n+1}$ = Fracció massica del component "a" al solvent.

$x_{a,n}$ = Fracció massica del component "a" al refinat.

$y_{a,1}$ = Fracció massica del component "a" a l'extracte.

- Àcid acètic

$$2811,11 \cdot 0,4825 + 4850 \cdot 0 = 6303,1 \cdot 0,211 + 0,02 \cdot 1358$$

$$1356,35 \text{ Kg/h} = 1357,11 \text{ Kg/h}$$

La petita diferencia es deguda a l'error produït per les xifres significatives alhora de realitzar les operacions.

- APAP

$$2811,1 \cdot 0,0351 + 4850 \cdot 0 = 6303,1 \cdot 0,01567 + 0 \cdot 1358$$

$$94,73 \text{ Kg/h} = 94,55 \text{ Kg/h}$$

La petita diferencia es deguda a l'error produït per les xifres significatives alhora de realitzar les operacions.

- PNP

$$2811,1 \cdot 0,000215 + 4850 \cdot 0 = 6303,1 \cdot 0,000064 + 0,000148 \cdot 1358$$

$$0,604 \text{ Kg/h} = 0,604 \text{ Kg/h}$$

Es comprova que tant el balanç de matèria global com el de component es compleixen en l'extractor.

- **Mètode de càlcul**

Per la realització del disseny de l'extractor, s'ha utilitzat el simulador Wolfram mathematical engineering.

En el simulador s'han introduït com a paràmetres el cabal d'aliment a cada extractor, el número d'etapes que es volen tenir en el procés i la composició d'àcid acètic d'entrada i la obtinguda en el refinat (**taula 11.8.1.d.**).

En la següent figura es mostra el diagrama (solució) que dona el simulador.

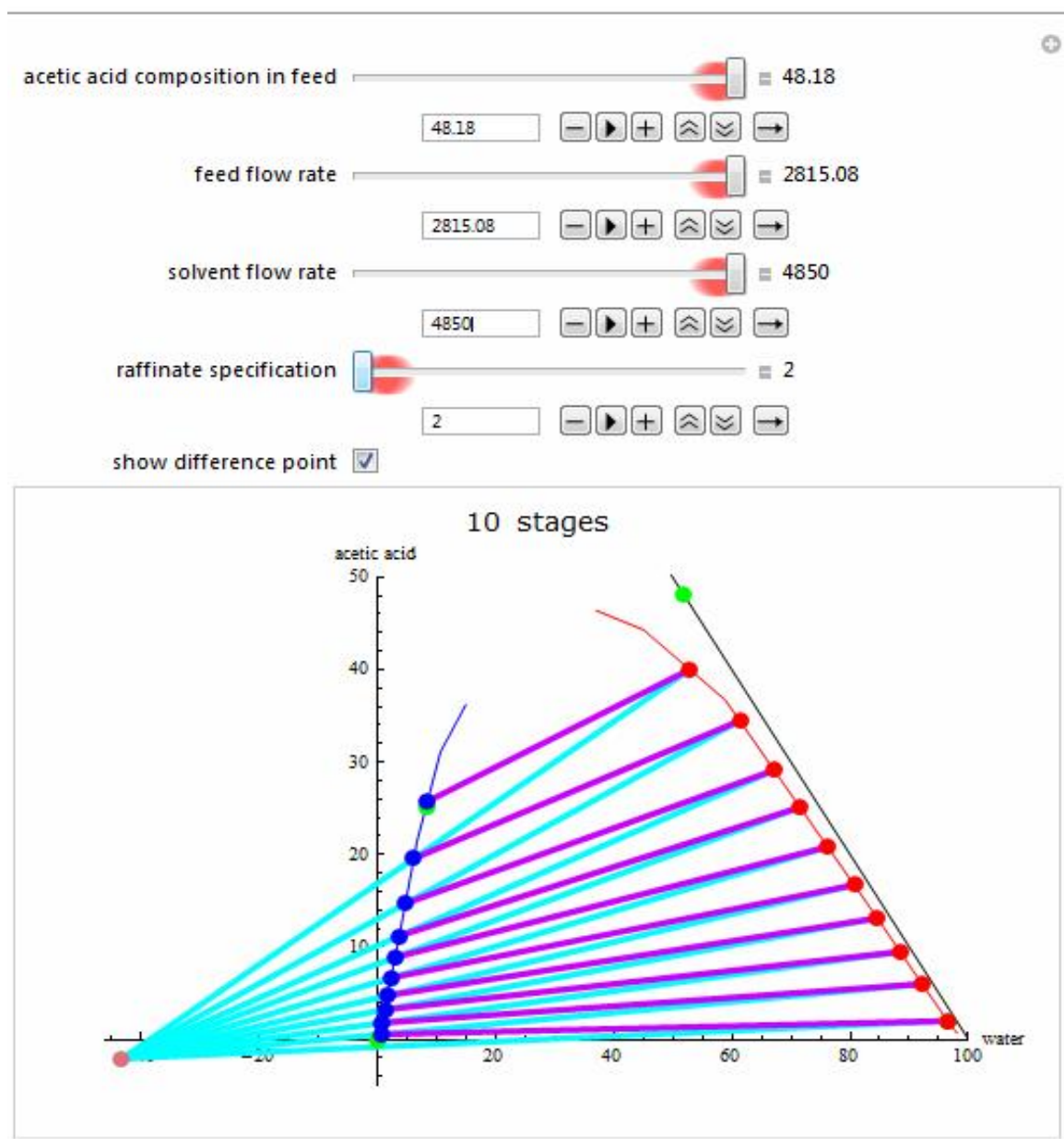


Figura 11.8.1.b. Diagrama del nostre sistema ternari, amb la representació del número d'etapes.

Cabal d'entrada (Kg/h)	Composició Àcid acètic aliment(% pes)	Composició àcid acètic refinat (% pes)	Numero d'etapes d'equilibri
2811,1	48,25	2	10

Taula 11.8.1.d. Paràmetres introduïts en el simulador.

Amb aquests paràmetres introduïts en el simulador, calcula el cabal de solvent necessari per fer possible l'extracció.

Cabal de dissolvent (éter isopropílic) = 4850 Kg/h

En les següents taules (Taula 1.5 i 1.6) es troben classificats els diferents grups d'equips d'extracció en funció de diferents criteris com l'estabilitat química de la mescla, el número d'etapes requerides, la dificultat de separació de la mescla, el mètode d'impulsió de la mescla en contracorrent entre d'altres.

	System criterion	Modest throughput	High throughput
Small number of stages required	Chemically stable Easy phase separation Low value	A, B or mixer-settler	E or F
	Chemically stable Appreciable value	C or D	E or F (not mixer-settler)
	Chemically unstable Slow phase separation	G or H	G or H
Large number of stages required	Chemically stable Easy phase separation Low value	B, C, D or mixer-settler	E or F
	Chemically stable Appreciable value	C or D	E or F (not mixer-settler)
	Chemically unstable Slow phase separation	G or H	G or H

Taula 11.3.1.e. Classificació dels equips d'extracció en diferents grups segons les propietats del sistema.

Segons aquests criteris s'ha optat per la utilització d'un Mixer-Settler per realitzar l'extracció, ja que es una mescla estable químicament, amb un numero d'etapes significatiu, i amb un valor afegit dels components a extreure moderat-baix.

Countercurrent flow produced by	Phase interdispersion by	Differential contactors	Stagewise contactors
Gravity	Gravity	GROUP A Spray column Packed column	GROUP B Perforated plate column
	Pulsation	GROUP C Pulsed packed column Pulsating plate column	GROUP D Pulsed sieve plate column Controlled cycling column
	Mechanical agitation	GROUP E Rotating disc contactor Oldshue-Rushton column Zehl column Graesser contractor	GROUP F Scheibel column Mixer-settlers
Centrifugal force	Centrifugal force	GROUP G Podbielniak Quadronic De Laval	GROUP H Westfalia Robatel

Taula 11.8.1.f. Classificació dels equips d'extracció en diferents grups segons la manera d'impulsar el fluid en contracorrent.

Tal i com s'observa en al figura 1.3 en el Mixer-Settler, cada etapa correspon a un mesclador (Mixer) seguit d'un decantador (Settler) on l'aliment i el solvent entren en contracorrent.

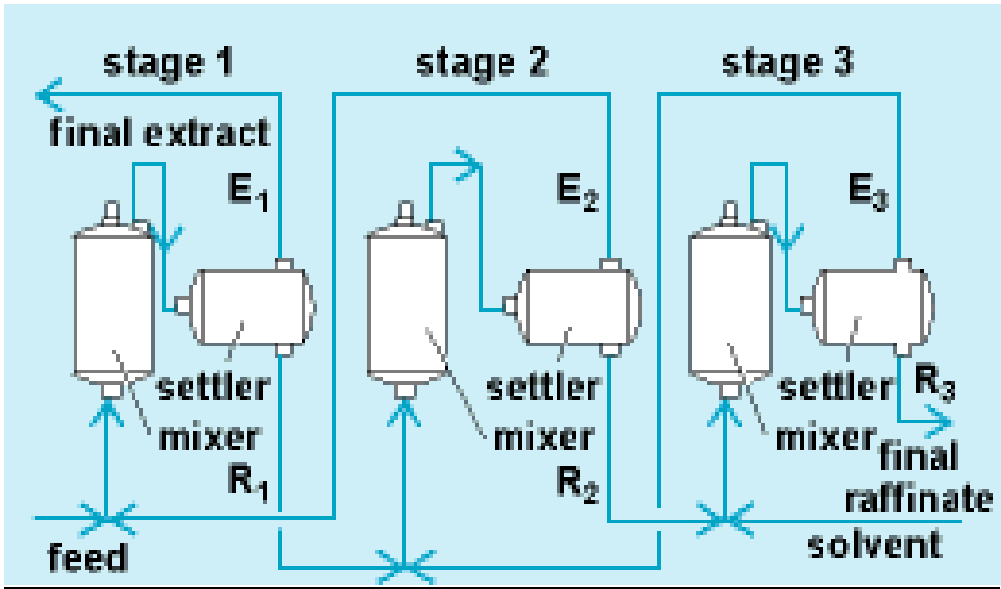


Figura 11.8.1.c. Diagrama d'un Mixer-Settler multietapa en contracorrent.

- **Disseny del mesclador**

El mesclador sol ser un tanc agitat circular o quadrat amb un agitador mecànic. Per motius operacionals i de disseny es decideix realitzar de tipus circular i amb fons i capçal toriesfèrics.

- **Càlcul del volum del tanc**

Bibliogràficament s'ha trobat que el temps de residència mínim de la mescla ha de ser d'uns 2 minuts, per realitzar el dimensionament del tanc s'agafarà el valor de 2.5 minuts.

A partir de l'expressió del temps de residència es calcula el volum del tanc agitat:

- Densitat mitjana de la barreja = 863 Kg/m³.

$$\tau = \frac{\text{Volum tanc agitat}}{\text{Cabal a tractor}}$$

$$\text{Volum tanc agitat} = \text{Cabal a tractor} \cdot \tau$$

$$\text{Volum tanc agitat} = 7661.1 \frac{\text{Kg}}{\text{h}} \cdot \frac{1 \text{ m}^3}{863 \text{ Kg}} \cdot \frac{1 \text{ h}}{60 \text{ min}} \cdot 3 \text{ min} = 0.44 \text{ m}^3$$

Volum tanc agitat amb un 15% de sobredimensionament es de 0.51 m³, es a dir 510 litres.

- **Dimensionament del mixer**

A partir del volum calculat anteriorment i establint com a relació h/d = 1,5 es calcula l'alçada i el diàmetre del mesclador.

L'alçada i el diàmetre s'aproximen a un numero enter.

✓ **Alçada mixer = 100 cm**

✓ **Diàmetre mixer = 80 cm**

- **Elecció del tipus d'agitador i la potència necessària.**

Un dels paràmetres clau per a fer una bona extracció líquid-líquid, és que hagi un bon contacte entre les fases, per així tenir una bona transferència de matèria entre fases. Aquest bon contacte s'aconsegueix tenint una bona agitació en el mesclador, per tant

l'elecció d'un tipus de mesclador o un altre serà un paràmetre important a tenir en compte.

En la figura 1.4 es troben diferents tipus d'agitador en funció de la viscositat de la mescla i del volum del mesclador.

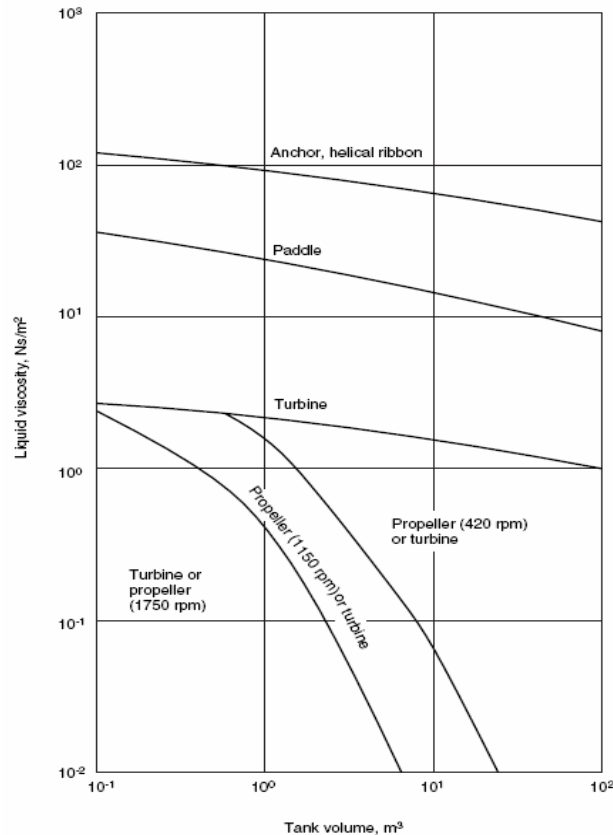


Figura 11.8.1.d. Elecció del tipus d'agitador en funció del volum del mesclador i de la viscositat de la mescla.

En el nostre sistema l'agitador òptim seria una turbina a unes 1750 rpm. Segons fabricants d'agitadors, el més adequat seria una turbina de tipus **SKR660 - Pumper Mixer** el qual es mostra a la següent figura:



Figura 11.8.1.e.. Agitador SKR660-Pumper Mixer 1

- ✓ Diàmetre de l'agitador es calcula segons la correlació següent:

$$\text{Diàmetre agitador} = 0.16 \cdot \text{Diàmetre mesclador}$$

$$\text{Diàmetre agitador} = 13 \text{ cm}$$

- ✓ Distància entre el fons i el agitador, és la mateixa que el diàmetre de l'agitador.

• Disseny del decantador (Settler)

El decantador utilitzat per cada etapa en el Mixer-Settler realitza la separació de fases mitjançant la força de la gravetat i utilitza com a paràmetres de disseny la densitat de les dues fases, la viscositat de les dues fases i el cabal volumètric respectivament.

➤ Càlcul del cabal aquos a tractar

A continuació es calcula el cabal de fase aquosa a tractar del qual dependrà l'àrea d'interfase necessària per fer una bona separació.

- Densitat fase aquosa 1000,58 Kg/h

$$1358 \frac{\text{Kg}}{\text{h}} \cdot \frac{1 \text{ m}^3}{1058 \text{ Kg}} \cdot \frac{1 \text{ h}}{3600 \text{ s}} = 3.57 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$$

Bibliogràficament es troba que per a cabals més petits a $4 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$ s'utilitzi un decantador vertical.

➤ Càlcul de la velocitat terminal de la fase orgànica

Mitjançant la Llei de Stokes calculem la velocitat terminal de la fase orgànica mitjançant l'expressió:

$$u_d = \frac{d_d^2 g (\rho_d - \rho_c)}{18 \mu_c}$$

On:

u_d = velocitat terminal de la fase orgànica.

d_d = diàmetre de la gota (aprox. 85 μm).

g = acceleració de la gravetat (9,81 m/s).

μ_c = viscositat de la fase aquosa.

ρ_d i ρ_c = viscositat de la fase orgànica i aquosa respectivament.

Dades:

- Densitat fase orgànica: 785 Kg/m³
- Densitat fase aquosa 1000.6 Kg/m³
- Viscositat fase aquosa 1 mN·s/m²

$$U_d = \frac{(85 \cdot 10^{-6} \text{ m})^2 \cdot 9.81 \frac{\text{m}}{\text{s}} \cdot (785 \text{ Kg/m}^3 - 1000.6 \text{ Kg/m}^3)}{18 \cdot 1 \cdot 10^{-3} \text{ N} \cdot \text{s/m}^2}$$

$$U_d = -8.49 \cdot 10^{-4} \text{ m/s}$$

El signe de la velocitat terminal es negatiu degut a que es una velocitat que va en la direcció -y.

➤ Càlcul de l'àrea de la interfase

Aplicant la següent expressió i substituint els paràmetres calculats trobem l'àrea d'interfase necessària.

$$u_c = \frac{L_c}{A_i} = u_d$$

$$A_i = \frac{L_c}{U_d}$$

$$A_i = \frac{3.57 \cdot 10^{-4}}{8.49 \cdot 10^{-4}} = 0.42 \text{ m}^2$$

➤ Càlcul del radi, diàmetre i alçada del decantador vertical

Segons la següent expressió per a un sedimentador vertical, calculem el radi:

$$A_i = \pi r^2$$

$$r = \sqrt{0.174}$$

$$r = 0.37 \text{ m}$$

$$d = 2 \cdot 0.2332 = 0.74 \text{ m}$$

$$h = \text{aprox. 2,5 vegades el radi}$$

$$h = 1.85 \text{ m}$$

➤ Càlcul del temps de residència

La banda de dispersió es calcula normalment com un 10% de l'alçada del decantador vertical.

$$\tau = \frac{\text{Dispersió en la banda}}{U_d} = \frac{0.185}{8.49 \cdot 10^{-4}} = 217.9s$$

Els temps de residència recomanat ha de estar entre 2–5 min, per tant ens trobem dins el rang òptim d'operació.

➤ Càlcul de l'alçada d'extracció de la fase orgànica i aquosa

Per realitzar una bona separació de les fases a l'hora d'extreure cada una d'elles del decantador (Settler). Per aquest motiu cal determinar l'alçada a la que extreure cada una de les fases del Settler.

Per extreure la fase orgànica del decantador es realitzarà mitjançant un sistema de sífó. Per determinar l'alçada òptima d'extracció de cada una de les fases es realitza un balanç de pressions en el sistema. El balanç simplificat queda de la següent manera:

$$(z_1 - z_3)\rho_1 g + z_3 \rho_2 g = z_2 \rho_2 g$$

$$z_2 = \frac{(z_1 - z_3)\rho_1}{\rho_2} + z_3$$

On:

z_1 = alçada per extreure la fase orgànica (m).

z_2 = alçada per extreure la fase aquosa (m).

z_3 = alçada de la interfase (m).

ρ_1 = densitat de la fase orgànica (kg/m^3).

ρ_2 = densitat de la fase aquosa (kg/m^3).

Per motius de disseny l'alçada de l' interfase es fixa en la meitat de l'alçada del decantador (**0.925m**), i l'alçada per extreure la fase orgànica es fixa en un 90% de l'alçada del decantador (**1.67m**). Aplicant el balanç es calcula l'alçada necessària per extreure la fase aquosa del decantador mitjançant el sífó. En la figura 1.4 es pot observar les diferents alçades del sistema per l'extracció de les fases utilitzant el sistema de sífó per la fase aquosa.

$$z_2=1.45m$$

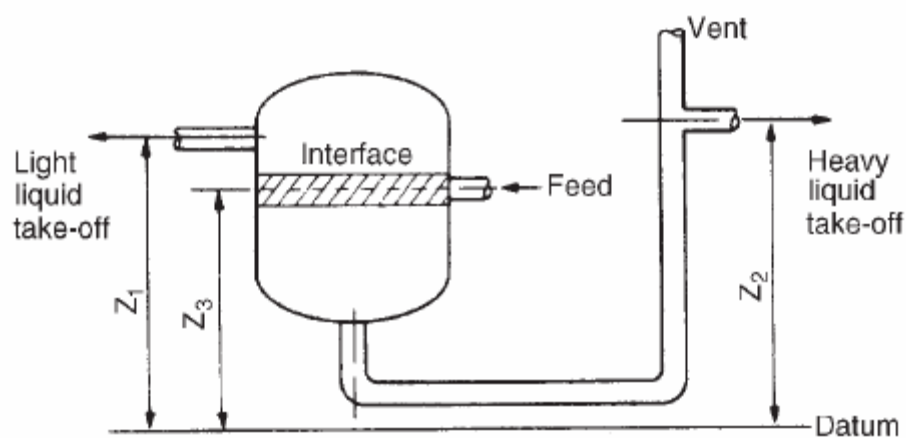


Figura 11.8.1.f. Diagrama de les diferents alçades d'extracció d'un Settler utilitzant un sistema de sífo.

11.9. DISSENY DELS CONDENSADORS I BESCANVIADORS DE CALOR TIPUS KETTLE-REBOILER

11.9.1. Disseny funcional dels condensadors

Per un disseny correcte de bescanviadors de calor del tipus condensador total, calen tenir en compte una sèrie de consideracions:

- El fluid de procés, que estarà en fase vapor, canvia de fase cap a l'estat líquid. Habitualment, aquest circula per carcassa.
- El fluid refrigerant, després de la seva utilització en aquest tipus de sistema, no arriba al seu punt d'ebullició i, per tant, no canvia de fase. Habitualment, aquest circularà per tubs.
- S'utilitzarà el **mètode de Kern** (explicat anteriorment), destinat al disseny de bescanviadors de calor sense canvi de fase. No obstant, es seguiran una sèrie de modificacions per solucionar el problema del canvi de fase. Aquestes consideracions:

1. Quan es fa el balanç d'energia, cal afegir un nou terme referit al calor latent del fluid condensat:

$$Q_{\text{bescanviar}} = Q_{L_{\text{fluidrefrigerant}}} \cdot C_{p_{\text{fluidrefrigerant}}} \cdot (T_{\text{out}} - T_{\text{in}})_{\text{fluidrefrigerant}} = Q_{L_{\text{vapor}}} \cdot C_{p_{\text{vapor}}} \cdot (T_{\text{in}} - T_{\text{out}})_{\text{vapor}} + Q_{\text{líquid}} \cdot \lambda_{\text{líquid}}$$

On el vapor és el fluid que s'ha de condensar i el líquid és el fluid que resulta de condensar el vapor.

2. Pel que fa als coeficients individuals de transferència de matèria, segons on es produeixi el fenomen de canvi de fase, la fórmula per calcular aquest paràmetre variarà considerablement:

Si el fenomen es produeix per tubs, l'expressió quedarà configurada de la següent manera:

$$h_i = 0,761 * \left(\frac{L * K_L^3 * \rho_L * (\rho_L - \rho_V) * g}{m_i * \mu_L} \right)^{1/3}$$

On:

L és la longitud del tub (m).

K_L , ρ_L i μ_L , són la conductivitat tèrmica (W/m·°C) i la densitat (kg/m³) i la viscositat (kg/(m·s)), respectivament del líquid resultant de la condensació

m_i és el cabal màssic (kg/s) del líquid resultant de la condensació. Si la condensació és total, serà igual al cabal del vapor.

g és la gravetat (m/s²)

El valor 0,761 correspon a una disposició dels tubs en horitzontal.

3. Pel que fa a les velocitats dels fluid tant per carcassa com per tubs, s'han de respectar els límits establerts per al mètode Kern. Tot i que, per culpa de l'estandardització de la llargada de tubs (6 o 3 metres nominals), unes velocitats que s'aproximin seran vàlides.
4. Les pèrdues de càrrega, tant per carcassa com per tubs, poden ser considerables, alhora de parlar de condensadors, encara que uns valors al voltant dels 50KPa serien correctes.
5. Uns valors bons respecte el sobredimensionament del coeficient global de transferència de calor es mouen en un rang des d'un 8 fins un 13 %.

Si el fenomen es produeix per carcassa, l'expressió quedarà configurada de la següent manera:

$$h_s = 3,75 \cdot 10^{-5} * P_c^{0,69} * \left(\frac{Q}{A}\right)^{0,7} * \left[1,8 * \left(\frac{P}{P_c}\right)^{0,17} + 4 * \left(\frac{P}{P_c}\right)^{1,2} + 10 * \left(\frac{P}{P_c}\right)^{10} \right]$$

On:

Q és el calor a bescanviar en el condensador (W).

A és l'àrea de bescanvi necessària per la condensació (m²).

P és la pressió de treball (Pa)

Pc és la pressió crítica (Pa) del líquid resultant de la condensació.

Disseny funcional dels condensador E-401b

El condensador s'ha dissenyat mitjançant el mètode de Kern, però hi ha alguns canvis en algunes equacions:

- **Calor intercanviat:**

$$Q = m_{gas} C_{p_{gas}} \Delta T_{gas} + m_{LiqRef} \lambda_{liqRef}$$

- **Coeficient de transferència individual per tubs:**

$$h_t = \left(\frac{L \cdot K_L^3 \rho_L (\rho_L - \rho_V) g}{m_t \mu_L} \right)^{1/3}$$

- Coeficient de transferència individual per carcassa:

$$h_s = 3,75e^{-5} P_c^{0,69} \left(\frac{q}{A} \right)^{0,7} \left[1,8 \left(\frac{P}{P_c} \right)^{0,17} + 4 \left(\frac{P}{P_c} \right)^{1,2} + 10 \left(\frac{P}{P_c} \right)^{10} \right]$$

Dades	Tubs		Carcassa	
Fase	L	L	V	L
Temperatura (°C)	20	40	90	80
Pressió (Pa)	101000		101000	
Cabal màssic (kg/s)	2,42	2,42	3,22	0,537
Densitat kg/m ³	998	992	2,632	1033,600
Cp J/kg°C	4190	4095	802,000	3950,000
Viscositat kg/m·s	5,08·10 ⁻⁵	7,38·10 ⁻⁵	6,18·10 ⁻⁵	8,28·10 ⁻⁴
Conductivitat W/m°C	0,622	0,632	0,461	0,502

Q	Δtmlog	Area (m ²)	Area corregida (m ²)
913915	86,90	9,5	10,9

R	P	F	Δtmlog
2,25	0,166	0,97	84,032

NT	6
NBC	1

- Tubs

1 tub / m ²	0,471
D extern tubs mm	50
Δx tubs mm	2
D intern tubs mm	46
Longitud dels tubs (m)	4
Nº de Tubs	36
Db m	0,443
Pitch mm	62,5
vt m/s	2,7
A pas tubs m ²	0,0199
D _{eq} al costat del tub mm	46
Cabal màssic per unitat d'Àrea Kg/m ²	42,842

Reynolds	3879599
Prandtl	10,3545

ht (W/m²°K)	25127
-------------------------------	-------

nº de pantalles deflectores	12
------------------------------------	----

- Carcassa**

D carcassa intern (m) / L/D			
T	S/W	P	U/L/M/N
1,018	1,18	1,215	1,423
4,3918187	4,59468339	4,765352	4,954660728

Càlcul area transversal de carcassa (Ast) (m²)	0,018
lb (m)	0,298
Gs (Kg/m²·s)	108,49
Vs (m/s)	0,31
deq (mm)	49,37

Reynolds	274,6881
Prandtl	81,714
hs (W/m²°K)	34234

- Coefficient global**

U Net W/m²°C	21804
1/Ur	0,00088
Ur W/m²°C	1016,03
Rs W/m²°C	2500
Rt W/m²°C	2500

- Pèrdua de càrrega**

ΔP tubs (isoterm) kN/m²	13,92
ΔP tubs (no isoterm) kN/m²	15,02
ΔP Carcassa kN/m²	0,0245

Disseny funcional dels condensador E-402b

Mateix procediment que l'anterior condensador

Dades	Tubs		Carcassa	
Fase	<i>L</i>	<i>L</i>	<i>V</i>	<i>L</i>
temperatura °C	20	40	80	40
pressió Pa	101000		101000	
cabal màssic Kg/s	4,33	4,33	2,69	2,69
densitat Kg/m³	998	992	8,63	760
Cp J/Kg°C	4190	4095	832	3650
Viscositat Kg/m*s	$5,08 \cdot 10^{-5}$	$7,38 \cdot 10^{-5}$	$9,18 \cdot 10^{-5}$	$6,77 \cdot 10^{-4}$
Conductivitat W/m°C	0,622	0,632	0,561	0,573

Q	Δt_{mlog}	Àrea m²	Àrea corregida
-107318,523	49,83	2,2	2,6

R	P	F	Δt_{mlog}
1,5	0,266	0,965	40,96

npt	4
nps	1

- Tubs

1 tub / m²	0,314
Dextern tubs mm	50
Dx tubs mm	2
Dintern tubs mm	46
Longitud dels tubs (m)	2
Nº de Tubs	10
Db m	0,268
Pitch mm	62,5
vt m/s	1,0
Apas tubs m²	0,064
Deq al costat del tub mm	46
Cabal màssic per unitat d'àrea	44,575

Reynolds	4036370
Prandtl	10,35
ht (W/m²°K)	1242

nº de pantalles deflectores	29
------------------------------------	----

- Carcassa

<i>Diàmetre carcassa intern (m) / L/D</i>			
<i>T</i>	<i>S/W</i>	<i>P</i>	<i>U/L/M/N</i>
0,4481	0,4130	0,3963	0,3700
4,4628351	4,84249912	5,04636	5,405610508

<i>Càlcul area transversal de carcassa (Ast) m²</i>	0,0080
<i>lb /m</i>	0,100
<i>Gs Kg/m²·s</i>	182,98
<i>Vs m/s</i>	0,33
<i>deq mm</i>	49,37
<i>hs (W/m²°K)</i>	21212

<i>Reynolds</i>	463,28
<i>Prandtl</i>	81,7142

- Coeficient global

<i>U Net W/m²°C</i>	21763,42
<i>1/Ur</i>	0,000880731
<i>Ur W/m²°C</i>	1135,420127
<i>Rs W/m²°C</i>	2500
<i>Rt W/m²°C</i>	2500

- Pèrdua de càrrega

<i>ΔP tubs (isoterm) kN/m²</i>	0,91
<i>ΔP tubs (no isoterm) kN/m²</i>	1,93
<i>ΔP Carcassa kN/m²</i>	0,0211

Disseny funcional dels condensador E-405a

<i>Dades</i>	<i>Tubs</i>		<i>Carcassa</i>	
<i>Fase</i>	<i>V</i>	<i>L</i>	<i>L</i>	<i>L</i>
<i>Temperatura °C</i>	105	80	20	40
<i>Pressió Pa</i>	505000		101000	
<i>Cabal màssic kg/s</i>	0,825	0,825	0,459	0,459
<i>Densitat kg/m³</i>	88,44	1613	998	992
<i>Cp J/kg°K</i>	802	3950	4190	4095
<i>Viscositat kg/m·s</i>	6,08·10 ⁻⁵	6,27·10 ⁻⁴	5,08·10 ⁻⁵	7,38·10 ⁻⁵
<i>Conductivitat W/m°K</i>	0,561	0,573	0,622	0,632

<i>Q</i>	<i>Δtmlog</i>	<i>Àrea m²</i>	<i>Àrea corregida</i>
5480265,18	86,5	42,2	42,2

<i>R</i>	<i>P</i>	<i>F</i>	$\Delta t mlog$
5	0,142857	0,99	86,5

<i>npt</i>	12
<i>nps</i>	3

- Tubs

<i>1 tub / m²</i>	0,097
<i>Dextern tubs mm</i>	16
<i>Δx tubs mm</i>	2
<i>Dintern tubs mm</i>	12
<i>Longitud dels tubs (m)</i>	1,8
<i>Nº de Tubs</i>	466
<i>Db m</i>	0,842
<i>Pitch mm</i>	20
<i>Vt m/s</i>	1,20

<i>A pas tubs (m²)</i>	0,36
<i>D_{eq} al costat del tub (mm)</i>	46
<i>Cabal màssic per unitat d'Àrea</i>	9,722

<i>Reynolds</i>	770,83
<i>Prandtl</i>	27,85
<i>ht (W/m²°K)</i>	43551,49

- Carcassa

<i>Diàmetre carcassa intern (m) / L/D</i>			
<i>T</i>	<i>S/W</i>	<i>P</i>	<i>U/L/M/N</i>
0,5	0,46	0,42	0,40
4,104	4,168	4,307	4,378

<i>nº de pantalles deflectores</i>	18
------------------------------------	----

<i>Càlcul àrea transversal de carcassa (Ast) m²</i>	0,0404
<i>lb /m</i>	0,099
<i>Gs Kg/m²*s</i>	11,33
<i>Vs m/s</i>	0,2
<i>deq mm</i>	11,36

<i>Reynolds</i>	3053,65
<i>Prandtl</i>	12,19
<i>hs (W/m²°K)</i>	2755,3

- Coeficient global

R_s W/m²°C	2500
R_t W/m²°C	2500

U Net W/m²°C	19749,8
$1/U_r$	0,00065
U_r W/m²°C	1536

- Pèrdua de càrrega

ΔP tubs (isoterm) kN/m²	20,13
ΔP tubs (no isoterm) kN/m²	27,8
ΔP Carcassa kN/m²	65,01

Disseny funcional dels condensador E-406a

Dades	Carcassa		Tubs	
Fase	V	L	L	L
Temperatura °C	120	80	20	40
Pressió Pa	101000		101000	
Cabal màssic kg/s	0,825	0,825	0,459	0,459
Densitat kg/m³	88,44	1613	998	992
C_p J/kg°C	802	3950	4190	4095
Viscositat kg/m·s	$6,08 \cdot 10^{-5}$	$6,27 \cdot 10^{-4}$	$5,08 \cdot 10^{-5}$	$7,38 \cdot 10^{-5}$
Conductivitat W/m°C	0,561	0,573	0,622	0,632

Q	Δt_{mlog}	Àrea m²	Àrea corregida
335327,55	69,56	0,4	0,4

R	P	F	Δt_{mlog}
0,5	0,4	0,99	67,43

n_{pt}	2
n_{ps}	1

- Tubs

1 tub / m²	0,037
D extern tubs mm	16
Δx tubs mm	2
D intern tubs mm	12
Longitud dels tubs (m)	0,75
Nº de Tubs	12
D_b m	0,0842

Pitch mm	20
Vt m/s	1,5

Àrea pas tubs m^2	0,36
D_{eq} al costat del tub mm	46
Cabal màssic per unitat d'Àrea	9,722

Reynolds	28522,24
Prandtl	4,25
ht ($W/m^2 \cdot K$)	11383,61

- Carcassa**

Diàmetre de carcassa intern (m) / L/D			
T	S/W	P	U/L/M/N
0,2	0,13	0,12	0,09
4,104	4,168	4,307	4,378

nº de pantalles deflectores	3
------------------------------------	----------

Càlcul area transversal de carcassa (A_{st}) m^2	0,0404
lb /m	0,030
Gs $Kg/m^2 \cdot s$	342,84
Vs m/s	0,34
deq mm	11,36

Reynolds	3053,65
Prandtl	12,19
hs ($W/m^2 \cdot K$)	2755,3

- Coefficient global**

Rs $W/m^2 \cdot ^\circ C$	2500
Rt $W/m^2 \cdot ^\circ C$	2500

U Net $W/m^2 \cdot ^\circ C$	19749,8
1/Ur	0,00065
Ur $W/m^2 \cdot ^\circ C$	1536

- Pèrdua de càrrega**

ΔP tubs (isoterm) KN/m^2	8,13
ΔP tubs (no isoterm) KN/m^2	9,90
ΔP Carcassa KN/m^2	5,60

Disseny funcional dels condensador E-403a

Mateix procediment que l'anterior condensador:

Dades	Tubs		Carcassa	
Fase	<i>L</i>	<i>L</i>	<i>V</i>	<i>L</i>
Temperatura °C	20	40	105	80
Pressió Pa	101000		101000	
Cabal màssic kg/s	2,633	2,633	1,780	1,780
Densitat kg/m³	998	992	2,63	760
Cp J/Kg°C	4190	4095	2291	4193
Viscositat Kg/m·s	$5,08 \cdot 10^{-5}$	$7,38 \cdot 10^{-5}$	$6,08 \cdot 10^{-5}$	$6,27 \cdot 10^{-4}$
Conductivitat W/m°C	0,622	0,632	0,508	0,494

Q	Δt_{mlog}	Àrea m²	Àrea corregida
-381324,09	-78,30	3,2	3,3

R	P	F	Δt_{mlog}
2	0,285	0,99	-77,521

npt	6
nps	1

- Tubs**

1 tub (m²)	0,47
Dextern tubs (mm)	50
Δx tubs (mm)	2
Dintern tubs (mm)	46
Longitud dels tubs (m)	3
Nº de Tubs	7,95
Db (m)	0,307
Pitch (mm)	62,5
Vt (m/s)	1,74

Àrea pas tubs (m²)	0,041
Deq al costat del tub (mm)	46
Cabal màssic per unitat d'Àrea (kg/m²s)	62,84

Reynolds	5690940
Prandtl	10,35
ht (W/m²°K)	20248530

- **Carcassa**

<i>Diàmetre carcassa intern (m) / L/D</i>			
<i>T</i>	<i>S/W</i>	<i>P</i>	<i>U/L/M/N</i>
0,5003	0,4662	0,4481	0,4222
5,996	6,4346	6,695	7,105

<i>Càlcul area transversal de carcassa (Ast) m2</i>	
<i>lb /m</i>	0,10
<i>Gs (lg/m²·s)</i>	178,0
<i>Vs m/s</i>	0,34
<i>deq mm</i>	35,5
<i>hs (W/m²°K)</i>	3936

<i>Reynolds</i>	324,122
<i>Prandtl</i>	81,711

- **Coeficient global**

<i>U Net W/m²°C</i>	21789,74
<i>1/Ur</i>	0,00060
<i>Ur W/m²°C</i>	1644
<i>Rs W/m²°C</i>	5000
<i>Rt W/m²°C</i>	3000

- **Pèrdua de càrrega**

<i>ΔP tubs (isoterm) kN/m²</i>	6,57
<i>ΔP tubs (no isoterm) kN/m²</i>	7,03
<i>ΔP Carcassa kN/m²</i>	0,024

11.9.2. Disseny funcional dels bescanviadors tipus Kettle-Reboiler

Aquest tipus especial de bescanviador de calor té una sèrie de consideracions tals que ens permeten un disseny bastant correcte, encara que per la seva complexitat, hi hauran punts que són difícils de trobar una relació idònia per trobar certs paràmetres que a priori són importants i que no són contemplats a la bibliografia.

Les consideracions seran les següents:

- El fluid de procés, que estarà en fase líquida, farà parcialment un canvi de fase cap a l'estat vapor. Habitualment, aquest circularà per carcassa.
- La majoria de fluids escalfadors, després de la seva utilització en aquest tipus de sistema, sol arriba al seu punt d'ebullició, i per tant canviarà de fase. Habitualment s'utilitza vapor a pressió moderada, el qual circularà per tubs.
- En aquest cas, també s'utilitzarà el mètode de Kern, encara que es seguiran altres consideracions. Quan es fa el balanç d'energia, cal afegir un nou terme referit al calor latent del fluid condensat:

$$\begin{aligned} \text{Calor a bescanviar} &= Q_{L, \text{vapor de servei}} * C_{p, \text{vapor de servei}} * (T_{in} - T_{out})_{\text{vapor de servei}} + Q_{L, \text{vapor condensat}} * \lambda_{\text{vapor condensat}} = \\ &= Q_{L, \text{líquid de procés}} * C_{p, \text{líquid de procés}} * (T_{out} - T_{in})_{\text{líquid de procés}} + Q_{L, \text{vapor produït}} * \lambda_{\text{líquid de procés}} \end{aligned}$$

On el vapor de servei condensa, i el líquid de procés que entra al reboiler arribarà al seu punt d'ebullició, i per tant també canviarà de fase. Cal considerar un 5% de pèrdues, llavors, s'ha de sumar un 5% del valor de calor bescanviat a aquest mateix per considerar les pèrdues.

- Per que fa als coeficients individuals de transferència de calor, es seguirà el criteri esmentat per els condensadors total. Com també per sobredimensionament del valor de la coeficient global de transferència de calor.
- Per el càlcul del diàmetre de la carcassa, es seguirà un criteri diferent. La relació entre el diàmetre de la carcassa i el diàmetre del feix de tubs (D_s/D_b) depèn del valor de la relació entre el calor bescanviat al kettle-reboiler i l'àrea necessària per aquest bescanvi (Q/A). Les dades que s'aplicaran en aquest criteri seran.
- Hi ha un valor màxim per la relació Q/A , i es la següent:

$$\left(\frac{Q}{A}\right)_{\max} = K_b * \left(\frac{\text{pitch}}{De}\right) * \left(\frac{\lambda_{\text{líquid de procés}}}{N^{\circ} \text{ de tubs}^{0,5}}\right) * \left[\sigma * g * (\rho_L - \rho_V) * \rho_V^2\right]^{1/4}$$

On:

K_b depèn del pitch que es tria i σ es la tensió superficial del líquid a evaporar. La relació Q/A del nostre sistema ha de ser sempre més petita que el 70% del valor $(Q/A)_{\max}$

- Cal definir l'altura entre la carcassa i el nivell del líquid (freeboard), i la distància entre el nivell del líquid i el feix de tubs ($WH = D_s - D_b - \text{freeboard}$). L'amplada que ocupa el líquid respecte el diàmetre de la carcassa (L_c) es calcula amb la següent relació:

$$L_c = (D_s^2 - W_H^2)^{1/2}$$

$$v_{\max} = 0,2 * \left(\frac{\rho_L - \rho_V}{\rho_L} \right)^{1/2}$$

- Si l'àrea que ocupa el líquid es ($L_c * \text{Longitud dels tubs}$), la velocitat del vapor (m/s) serà igual a:

$$v_{\text{vapor}} = \frac{(\text{cabal màssic} / \text{densitat})}{(L_c * \text{longitud tubs})}$$

- Per el càlcul de les pèrdues de carrega, s'ha de fer una mitja entre les pèrdues respecte els tubs i respecte la carcassa. Segons la bibliografia, un valor al voltant dels 60 KPa es correcte.

Disseny funcional dels reboiler E-404a

Un altre cop s'utilitza el mètode Kern, però amb algunes consideracions a tenir en compte:

- Les correlacions dels coeficients individuals són les mateixes que las del condensador.
- Per avaluar el diàmetre de carcassa s'utilitza la següent taula:

Q/A	Ds/Db
2,27E+05	2,2
1,70E+05	1,95
1,40E+05	1,6
9,10E+04	1,45
<9,e4	1,35

Dades	Tubs		Carcassa	
Fase	V	L	L	V
Temperatura °C	150	130	120	130
Pressió Pa	505000		101000	
Cabal màssic Kg/s	1,225	1,225	6,380	6,080
Densitat Kg/m ³	2,65	875	1450	10,54
Cp J/Kg°C	2,957	2,986	802	744
Viscositat Kg/m*s	5,08·10 ⁻⁵	7,36·10 ⁻⁴	1,68·10 ⁻⁵	1,90·10 ⁻⁵
Conductivitat W/m°C	0,028	0,633	0,661	0,030

Q	Δtmlog	Àrea m ²	Àrea corregida
384238,592	84,90	6,03	6,10

<i>R</i>	<i>P</i>	<i>F</i>	$\Delta t m \log$
0,8	0,384	0,99	84,05

<i>npt</i>	6
<i>nps</i>	1

- Tubs

<i>1 tub (m²)</i>	0,471
<i>Dextern tubs (mm)</i>	50
<i>Δx tubs (mm)</i>	2
<i>Dintern tubs (mm)</i>	46
<i>Longitud dels tubs (m)</i>	3
<i>Nº de Tubs</i>	14
<i>Db (m)</i>	0,454
<i>Pitch (mm)</i>	62,5
<i>Vt (m/s)</i>	2,25

<i>Àrea pas tubs (m²)</i>	0,077
<i>Deq al costat del tub (mm)</i>	46
<i>Cabal màssic per unitat d'Àrea (Kg/m²s)</i>	15,728

<i>Reynolds</i>	44661809
<i>Prandtl</i>	0,001
<i>ht (W/m²°K)</i>	3267

- Carcassa

<i>Diàmetre de carcassa intern (m) / L/D</i>			
<i>T</i>	<i>S/W</i>	<i>P</i>	<i>U/L/M/N</i>
0,6971	0,6672	0,6434	0,6195
4,3	4,5	4,7	4,8

<i>Càlcul area transversal de carcassa (Ast) m²</i>	0,020
<i>lb /m</i>	0,145
<i>Gs (Kg/m²*s)</i>	298,88
<i>Vs m/s</i>	0,25
<i>deq mm</i>	49,37
<i>hs (w/m²°K)</i>	2564

<i>Reynolds</i>	75672,30
<i>Prandtl</i>	0,2177

- Coeficient global

<i>U Net W/m²°C</i>	12639,125
--------------------------------	-----------

$1/U_r$	0,00102
$U_r \text{ W/m}^2\text{°C}$	977,90
$R_s \text{ W/m}^2\text{°C}$	5000
$R_t \text{ W/m}^2\text{°C}$	3000

- Pèrdua de càrrega

$\Delta P \text{ tubs (isoterm) KN/m}^2$	6,9
$\Delta P \text{ tubs (no isoterm) KN/m}^2$	7,02
$\Delta P \text{ Carcassa KN/m}^2$	0,045

Disseny funcional dels reboiler E-403b

Dades	Tubs		Carcassa	
Fase	V	L	L	L
Temperatura °C	160	130	110	110
Pressió Pa	505000		101000	
Cabal màssic kg/s	1,225	1,225	7,558	0,555
Densitat kg/m ³	2,65	875	1726	1345
Cp J/kg°C	2,957	2,986	802,000	3950
Viscositat kg/m·s	$5,08 \cdot 10^{-5}$	$7,36 \cdot 10^{-4}$	$1,68 \cdot 10^{-5}$	$6,24 \cdot 10^{-4}$
Conductivitat W/m°C	0,022	0,633	0,561	0,573

Q	Δt_{mlog}	Àrea (m ²)	Àrea corregida
186557,93	24,66	6,9	10,6

R	P	F	Δt_{mlog}
1,5	0,4	0,65	16,3

npt	2
nps	1

- Tubs

1 tub (m ²)	0,235
Dextern tubs (mm)	50
Δx tubs (mm)	2
Dintern tubs (mm)	46
Longitud dels tubs (m)	2,4
Nº de Tubs	46
Db (m)	0,562
Pitch (mm)	62,5

<i>Vt (m/s)</i>	20,25
------------------------	-------

<i>Àrea pas tubs (m²)</i>	1,62
<i>Deq al costat del tub (mm)</i>	46
<i>Cabal màssic per unitat d'Àrea (Kg/m²s)</i>	3,68

<i>Reynolds</i>	333473,7
<i>Prandtl</i>	0,0084
<i>ht (W/m²°K)</i>	495793,03

- Carcassa**

<i>Diàmetre carcassa intern (m) / L/D</i>			
<i>T</i>	<i>S/W</i>	<i>P</i>	<i>U/L/M/N</i>
0,6171	0,6072	0,5934	0,572
4,3	4,5	4,7	4,8

<i>Càlcul area transversal de carcassa (Ast) m²</i>	0,021
<i>lb /m</i>	0,124
<i>Gs (Kg/m²*s)</i>	96,56
<i>Vs m/s</i>	0,39
<i>deq mm</i>	49,37
<i>hs (w/m²°K)</i>	9852,21

<i>Reynolds</i>	244,49
<i>Prandtl</i>	81,71

- Coefficient global**

<i>U Net W/m²°C</i>	9595,93
<i>1/Ur</i>	0,00093
<i>Ur W/m²°C</i>	1061,97
<i>Rs W/m²°C</i>	2500
<i>Rt W/m²°C</i>	2500

- Pèrdua de càrrega**

<i>ΔP tubs (isoterm) KN/m²</i>	6,61
<i>ΔP tubs (no isoterm) KN/m²</i>	7,07
<i>ΔP Carcassa KN/m²</i>	0,0019

11.10. DISSENY DELS CRISTAL·LITZADORS

11.10.1 Disseny funcional i mecànic dels cristal·litzadors

- **Disseny funcional dels cristal·litzadors**

Com es pot observar en el diagrama de procés, aquesta planta de producció de paracetamol consta de dos cristal·litzadors de paracetamol (àrea 400b). Les etapes de cristal·lització serveixen tant per la separació com per la purificació del producte desitjat, així com també per obtenir aquest en un estat sòlid més estable.

En primer dels cristal·litzadors de paracetamol es cristal·litza la major part del producte. En el segon es recupera gran part del producte perdut amb les aigües mares de la primera cristal·lització, que prèviament són tractades amb una extracció i una destil·lació. Finalment, es fa una recristal·lització, ja que tot amb la segona cristal·lització no s'arribaria a la producció de paracetamol desitjada.

Degut a la manca d'informació bibliogràfica respecte el comportament del paracetamol davant d'una cristal·lització, s'ha fet el disseny d'aquesta operació seguint les consideracions generals trobades en el llibre *Handbook of industrial crystallization*, on relata que de forma genèrica, aquests tipus de compostos com l'APAP tenen tendència a cristal·litzar amb facilitat amb aigua, degut a la baixa solubilitat d'aquest en aquest medi.

En el cas d'aquestes cristal·litzacions el medi, però, és una mescla d'àcid acètic i aigua, sent majoritari l'àcid acètic, en el qual el paracetamol té major solubilitat.

En els dos casos s'ha decidit treballar a:

- Temperatura moderada (15°C), per evitar la descomposició abans de que precipiti.
- Pressió atmosfèrica.

En aquest cas s'ha escollit que els cristal·litzadors operin de forma contínua, per això, cal crear una solució sobresaturada, condició indispensable per poder realitzar aquesta operació.

Per crear sobresaturació existeixen principalment quatre mètodes: canviar la temperatura refredant, per evaporació del solvent, per reacció química o canviant la composició del solvent.

El primer cristal·litzador (CR-401b) s'alimenta amb el corrent de sortida de M-302b. L'entrada del segon cristal·litzador (CR-402b) prové de la columna de destil·lació C-401b, però per a poder ser capaç de refredar la solució fins a 15 °C mitjançant la camisa d'aquest equip, cal refredar-la prèviament mitjançant un bescanviador de calor intermedi.

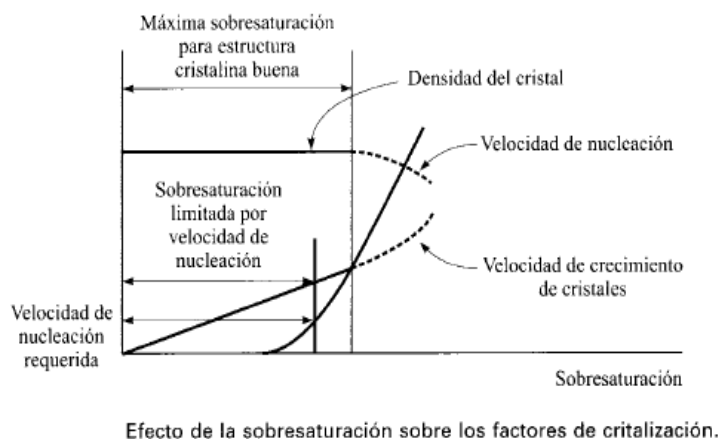
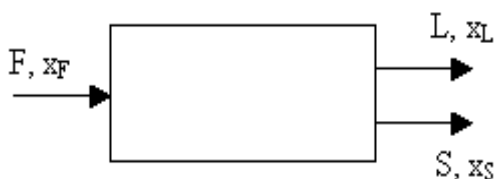


Figura 11.10.1.a. Efecte de la sobresaturació sobre els factors de cristal·lització

En el cas del paracetamol s'ha trobat bibliogràficament (patent 5,648,535 per APAP) que el millor mètode és creant la sobresaturació produïda per refredament sense evaporació apreciable, és a dir, disminuint la temperatura.

- **Balanç de matèria**

A partir del següent esquema simplificat d'un cristal·litzador amb evaporació menyspreable ($x_V=0$ i $V=0$) es poden deduir les equacions de balanç de matèria:



Balanç total de matèria: $F = L + S$

Balanç de matèria de APAP: $F \cdot x_F = L \cdot x_L + S \cdot x_S$

On:

F és el cabal de l'aliment (kg/h)

L és el cabal de líquid de sortida del magma (kg/h)

S és el cabal de sòlid de sortida del magma (kg/h)

x_F és la fracció d'APAP en l'aliment (kg APAP/kg totals)

x_L és la fracció d'APAP en el líquid del magma (kg APAP/kg totals)

$x_S = 1$ és la fracció d'APAP en el sòlid (cristalls) del magma (kg APAP/kg totals). x_S és 1, ja que el paracetamol cristall format no té aigües de cristallització.

Per tal de determinar la quantitat de paracetamol dissolta en el líquid s'han utilitzat les dades de solubilitat d'aquest compost en àcid acètic i aigua, a una temperatura de 15° C. Les dues dades s'han extret bibliogràficament de l'article "*Solubility of Paracetamol in Pure Solvents*" (Roger A. Granberg, and ke C. Rasmuson):

- Solubilitat en aigua a 15 ° C: 10.97 g paracetamol/kg aigua
- Solubilitat en àcid acètic a 15 °C: s'ha estimat en un valor de 65 g paracetamol/Kg àcid acètic. En aquest cas s'ha trobat només el valor de solubilitat per una temperatura de 30 °C, però s'ha buscat referències de components amb solubilitats semblants a 30 °C i amb característiques químiques que podrien ser equivalents per aquests valors de solubilitat.

El terme $x_L \cdot L$ (kg d'APAP en el líquid de sortida, és a dir, paracetamol no cristallitzat) s'ha calculat tenint en compte la solubilitat d'APAP en àcid acètic i aigua i les seves respectives fraccions màssiques. D'aquesta manera, sabent $x_L \cdot L$ i el cabal total de líquid (L) es calcula x_L .

El balanç de matèria del 1r cristal·litzador (CR-401b) de paracetamol es pot observar en la següent taula:

Components\ cabals màssics (kg/h)	Aliment (F)	Líquid (L)	Sòlid (S)	Vapor (V)
<i>paracetamol</i>	875,787	142,444	733,343	0
<i>aigua</i>	197,172	197,172	0	0
<i>àcid acètic</i>	2003,796	2003,796	0	0
<i>p-nitrofenol</i>	0,807	0,807	0	0
<i>total</i>	3077,562	2344,219	733,343	0

Taula 11.10.1.a Balanç matèria CR-401b

El balanç de matèria pel segon cristal·litzador (CR-402b) queda:

Components\ cabals màssics (kg/h)	Aliment (F)	Líquid (L)	Sòlid (S)	Vapor (V)
<i>paracetamol</i>	189,537	56,135	133,402	0
<i>aigua</i>	12,236	12,236	0	0
<i>àcid acètic</i>	800	800	0	0
<i>p-nitrofenol</i>	0,807	0,807	0	0
<i>total</i>	1002,580	869,178	133,402	0

Taula 11.10.1.b. Balanç matèria CR-402b

El balanç de matèria el recristal·litzador (CR-403b) queda:

Components\ cabals màssics (kg/h)	Aliment (F)	Líquid (L)	Sòlid (S)	Vapor (V)
<i>paracetamol</i>	62,805	6,328	56,477	0
<i>aigua</i>	128,55	128,55	0	0
<i>àcid acètic</i>	70,11	70,11	0	0
<i>p-nitrofenol</i>	0,404	0,404	0	0
<i>total</i>	261,869	205,392	56,477	0

Taula 11.10.1.c. Balanç matèria CR-403b

El rendiment de recuperació de solut anhidre = $(S \cdot x_S)/(F \cdot x_F)$, pel primer cristal·litzador és d'un 83,74% i pel segon d'un 70,38%. El rendiment de recuperació de solut anhidre en la recristal·lització és de 89,92%.

- **Dimensions dels equips**

- **Càlcul del volum dels cristal·litzadors**

Bibliogràficament (patent US6692768) s'ha trobat que la grandària de partícula de cristal·lització d'aquest tipus de productes farmacèutics i orgànics és al voltant de 200µm i que la velocitat de creixement aproximadament de $1 \cdot 10^{-8}$ m/s.

A partir de fixats aquests valors s'ha calculat el temps de residència pels tres cristal·litzadors treballant en continu segons l'equació següent que permet fer-ne una estimació (Randolph and Larson, 1988):

$$\tau = \frac{\langle L \rangle}{4 \cdot G_L}$$

On:

$\langle L \rangle$ és la grandària mitjana de cristall (m), 200µm.

G_L és la velocitat de creixement (m/s), suposada $1 \cdot 10^{-8}$ m/s (bibliogràficament *Mersmann and Kind, 1988*).

τ és el temps de residència (s)

Així doncs, el temps de residència és de 1,39 hores. A partir del temps de residència i dels cabals de sortida i les seves respectives densitats es calcula el volum requerit segons:

$$V = \left(\frac{m_L}{\rho_L} + \frac{m_{crist}}{\rho_{crist}} \right) \cdot \tau$$

Es sobredimensiona el volum de l'equip un 20%.

Tots els cristal·litzadors de la planta s'han dissenyat amb la mateixa geometria. Formats per un cos cilíndric acabat amb un tronc cònic a la part inferior i un capçal torisfèric a la part superior. El fons cònic facilita l'evacuació dels cristalls formats durant el procés.

Els volums de cada una d'aquestes parts s'ha calculat aplicant:

$$V_{cilindre} = \pi \left(\frac{D}{2} \right)^2 \cdot H$$

$$V_{tronccon} = \frac{1}{3} \cdot \pi \cdot h \cdot (R^2 + r^2 + R \cdot r)$$

On:

D és el diàmetre intern del cilindre (m)

H és l'alçada del cilindre (m)

h és l'alçada del tron cònic (m)

R és el radi major del tronc cònic (m), que és igual a D/2.

r és el radi menor del tronc cònic (m), en l'esquema d=2r.

L és la distància des del punt més alt del fons torisfèric fins on comença la part cilíndrica (m).

V és el volum (m³)

R_r=0,1·D (m), es fixa aquest valor pel disseny (*Klopper*, torisfèric decimal).

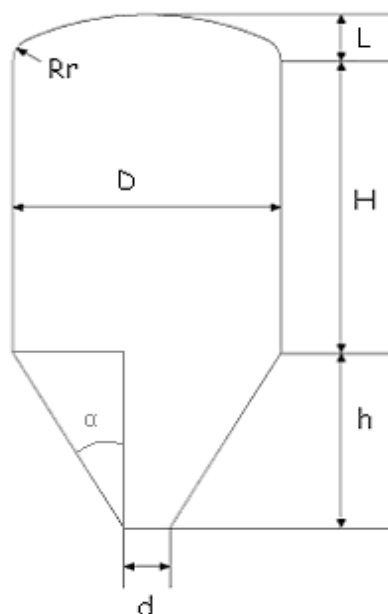


Figura 11.10.1.b. Esquema dels cristal·litzadors

Per calcular les dimensions del cristal·litzador es fixa el diàmetre del cilindre (D) que serà el mateix que el diàmetre major del tronc cònic (2R), també es fixa el diàmetre menor del tronc cònic (2r) i l'angle $\alpha=30^\circ\text{C}$. Sabent l'angle i que el catet oposat a aquest és $\frac{D-d}{2}$ es calcula h.

Amb totes les altres dimensions ja conegudes i el volum total i el del tronc cònic es calcula H.

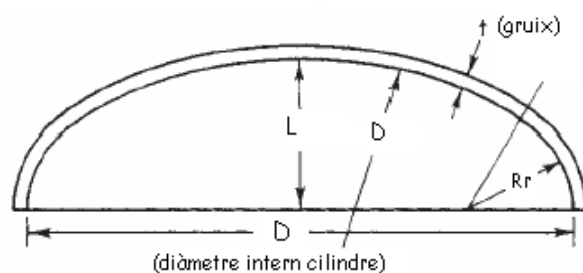


Figura 11.10.1.c. Part toriesfèrica

Dimensions	Cristal·litzador de APAP CR-401b	Cristal·litzador de APAP CR-402b	Recristal·litzador de APAP CR-403b
H (m)	1,87	1,02	0,57
D (m)	1,6	1,2	0,8
d (m)	0,3	0,3	0,4
h (m)	1,13	0,52	0,35
R _r (m)	0,16	0,12	0,08
Volum (m ³)	3,9	1,25	0,32
Volum (m ³) 20% sobredimensionat	4,68	1,495	0,39

Taula 11.10.1.d. Dimensions cristal·litzadors

- **Disseny de l'agitador**

Per tal d'afavorir la formació del precipitat, el cristal·litzador està equipat amb un agitador tipus àncora, amb un gran diàmetre d'impulsor, per arrossegar tots els cristalls que puguin haver quedat incrustats en les parets de l'equip. Es requereix que l'agitació en els cristal·litzadors sigui lenta, operant a baixa velocitat (en aquest cas es fixa 30 rpm) per evitar malmetre els cristalls formats.

El diàmetre de l'agitador d'àncora ha de ser un 95% del diàmetre intern del cilindre (D), és a dir, un 95% del diàmetre del tanc. Aquesta informació ha estat trobada en el Perry's Chemical Engineer's Handbook.

Per aquest tipus d'agitador el nombre de potència (N_p) és 2. A partir d'aquestes dades es calcula també la potència absorbida per l'agitador:

$$P = N_p \cdot \rho \cdot v^3 \cdot D_{\text{agitador}}^5$$

On:

$N_p = 2$ és el número de potència que és 2 per aquest tipus d'agitadors

ρ és la densitat (kg/m^3)

v és la velocitat d'agitació (rev/s), escollida 0,5 rev/s en els tres cristal·litzadors

D_{agitador} és el diàmetre de l'agitador (m)

P és la potència (W)

Equip	Diàmetre agitador (m)	Potència (W)
1r cristal·litzador CR-401b	1,52	2263
2n cristal·litzador CR-402b	1,14	527
Recristal·litzador CR-403b	0,76	68,72

Taula 11.10.1.e. Diàmetre i potència agitador

• Balanç d'energia

El balanç d'energia global d'un cristal·litzador pot descriure a partir de la següents equacions:

$$Q = L \cdot H_L + S \cdot H_S + V \cdot H_V - F \cdot H_F$$

$$Q = L \cdot [Cp_L^L (T_L - T_{ref})] + S \cdot [Cp_L^S (T_S - T_{ref}) + \lambda_{crist}] + V \cdot [Cp_L^V (T_V - T_{ref}) + \lambda_{vap}] - F \cdot [Cp_L^F (T_F - T_{ref})]$$

On:

Q és el calor que cal aportar o eliminar en el sistema (J/s)

F és el cabal molar d'aliment al cristal·litzador (mol/s)

L és el cabal molar de líquid de sortida del cristal·litzador (mol/s)

S és el cabal molar de sòlid de sortida del cristal·litzador (mol/s)

V és el cabal molar de vapor de sortida del cristal·litzador (mol/s), que com ja s'ha comentat anteriorment en el disseny d'aquests cristal·litzadors s'ha menyspreat

H_i entalpia de cada corrent (J)

λ_{crist} és el calor de cristal·lització (J/mol)

λ_{vap} és el calor de vaporització (J/mol)

Cp_L^i és el calor específic de cada corrent (J/mol·K)

T_i és la temperatura de cada corrent (°K)

T_{ref} és la temperatura de referència (°K)

Simplificacions i suposicions que s'han tingut en compte a l'hora de resoldre el balanç energètic:

- $T_F = T_{ref}$
- $T_{op} = T = T_L = T_S = T_V$, és a dir, hi ha equilibri tèrmic. T és la temperatura d'operació del cristal·litzador considerant que treballa a temperatura constant (°K).
- $x_V = 0$ i $V = 0$

Per tant, el balanç d'energia queda:

$$Q = S \cdot \lambda_{crist} - F \cdot [Cp_L^F \cdot (T_F - T)]$$

Al calor (Q) calculat a partir del balanç d'energia també cal sumar-li el calor aportat per l'agitador. Així doncs, el calor total a retirar (refredar) es calcula:

$$Q_{\text{total}} = Q + Q_{\text{agitador}} = Q + 0,92 \cdot P$$

On:

Q_{agitador} és el calor després per l'agitador (J/s)

P és la potència de l'agitador (W)

	Cristal·litzador CR-401b	Cristal·litzador CR-402b	Recristal·litzador CR-403b
Q_{total} (J/s)	116449,03	42609,71	16413,695
Q (J/s) P.A.	114367,51	41124,85	16350,471
Q_{agitador} (J/s)	2081,517	484,861	63,223
λ_{crist} (J/mol)	-21700 ¹	-21700 ¹	-21700 ¹
C_{pL} (J/mol·K)	111,167 ²	120,658 ²	83,08
T_F (°K)	343	348	358
T (°K)	288 ³	288 ³	288 ³

Taula 11.10.1.f. Dades balanç energia cristal·litzadors

- **Càlcul del cabal d'aigua necessària per a la refrigeració i àrea total de transmissió de calor**

Per començar cal determinar l'àrea màxima de bescanvi disponible com a la suma de les àrees lateral de les part cilíndrica i la del tronc cònic.

$$A_{\text{total màxima}} = A_{\text{lateral tronc cònic}} + A_{\text{lateral cilindre}} = \pi \cdot g \cdot (R + r) + 2 \cdot \pi \cdot H \cdot R$$

¹ Bibliogràficament: $\lambda_{\text{crist APAP}} = 24,05$ kJ/mol valor experimental i $\lambda_{\text{crist APAP}} = 21,7$ kJ/mol Grant, D.J.W.; Mehdizadeh, M.L, Chow, A.H-L, Fair-brother, J.E.Int.J Pharm, 1984. S'ha considerat $\lambda_{\text{crist APAP}} = 21,7$ kJ/mol.

² Bibliogràficament: Referència $C_{pL} = 99,8 \pm 2,8$ J/(mol·K) Neau et al., 1997. Valor de C_{pL} utilitzat estimat a partir de les C_{pL} dels components i les seves fraccions molars en l'aliment.

³ Cristal·lització a 15 °C, tal i com s'explica a la patent 5,648,535.

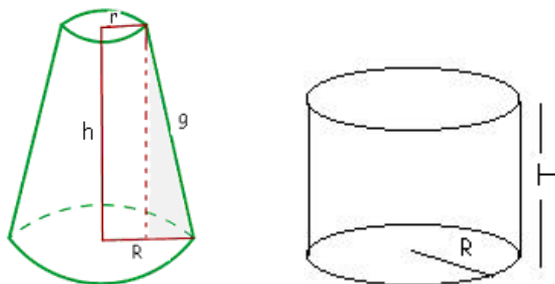


Figura 11.10.1.d. Esquema tronc cònic i cilindre

On g es calcula: $g^2 = (R-r)^2 + h^2$

Per eliminar el calor en CR-401b i CR-401b s'utilitza aigua glicolada al 30% provinent de l'equip de fred entrant a la camisa a $-13\text{ }^{\circ}\text{C}$ i sortint a $-5\text{ }^{\circ}\text{C}$.

En la recristal·lització (R-401b), per refredar s'utilitza aigua a $7\text{ }^{\circ}\text{C}$ proporcionada per un altre dels equips de fred del que es disposa a la planta. Aquesta sortirà del recristal·litzadors a $12\text{ }^{\circ}\text{C}$ i es retornarà al grup de fred.

Inicialment, es calcula el cabal de fluid de refrigeració necessari (aigua glicolada en CR-401b i CR-402b i aigua en CR-403b):

$$m = \frac{Q}{C_{p_{aigua}} \cdot (T_{sortidaH_2O} - T_{entradaH_2O})}$$

On:

- $C_{p_{aigua}}$ en aquest rang de temperatures es pot considerar constant i igual a $4180\text{ J}/(\text{kg}\cdot^{\circ}\text{C})$ i tenint en compte una densitat mitjana de l'aigua de refrigeració de $1000\text{ kg}/\text{m}^3$ es pot saber el cabal volumètric (m^3/s).
- Pel cas de l'aigua glicolada $C_{p_{aigua\text{glicolada}}} = 3726\text{ J}/(\text{kg}\cdot^{\circ}\text{C})$ i la densitat de l'aigua glicolada és de $1057\text{ kg}/\text{m}^3$.
- Q és el calor total a eliminar (J/s) i m el cabal màssic d'aigua de refrigeració necessari (kg/s).

Es calcula l'àrea imprescindible de mitja canya tenint en compte que la velocitat de circulació de líquids per canonades ha d'estar entre 1 i 3 m/s, fixant en els tres casos una velocitat de circulació de fluid refrigerant de 1 m/s.

$$A_{mitjacanya} = \frac{m}{\rho_{fluidH2O} \cdot v_{circulaci\grave{f}luid}}$$

$$D_{mitjacanya} = \sqrt{\frac{2 \cdot 4 \cdot A_{mitjacanya}}{\pi}}$$

Finalment, es calcula l'àrea total de transmissió de calor, fixant el valor del coeficient global de transmissió de calor de 500 W/(m²·°C). Referència trobada en el Perry's Chemical Engineer per camises U entre 200 i 850 W/(m²·°C) i entre aigua i components orgànics entre 200 i 750 W/(m²·°C).

$$A = \frac{Q}{U \cdot \left(T_{cris} - \left(\frac{T_{Eaigua} - T_{Saigua}}{2} \right) \right)}$$

D'aquesta manera s'obtenen les següents àrees de bescanvi i el percentatge que aquesta representa respecte el total de l'àrea disponible:

	Cristal·litzador CR-401b	Cristal·litzador CR-402b	Recristal·litzador CR-403b
Àrea màxima disponible de bescanvi (m²)	13,29	5,537	2,191
Àrea de bescanvi utilitzada (m²)	12,26	3,842	1,876
% Àrea utilitzada	92,28	69,376	85,612
D_{mitja canya} (mm)	97	54,3	44,7

Taula 11.10.1.g. Àrea de bescanvi utilitzada i diàmetre mitja canya cristal·litzadors

- **Disseny mecànic de la camisa**

Com ja s'ha explicat els cristal·litzadors disposen d'una camisa en forma de mitja canya per on hi circula el fluid refrigerant. Com que els tres cristal·litzadors treballen a pressió atmosfèrica, el gruix de disseny es calcularà a pressió de disseny interna i sobredimensionant un 15%. El material escollit pel seu aquest equip és acer AISI 304.

Cal tenir en compte les tres parts de què consta l'equip i determinar-ne la pressió interna de cada una d'elles. El disseny s'ha realitzat seguint les normes ASME.

La pressió de disseny (P) s'ha calculat amb la següent expressió (sobredimensionant un 15%):

$$P = (P_{operació} + h_L \cdot g \cdot \rho) 1,15$$

On:

$P_{operació}$ és la pressió a la que es treballa. En aquests tres casos a pressió atmosfèrica ($1,013 \cdot 10^5 \text{ N/m}^2 = 1,013 \cdot 10^5 \text{ Pa} \approx 1,013 \text{ bar}$)

h_L és l'altura de la columna de la mescla (m)

$g = 9,8 \text{ m/s}^2$ és la gravetat

ρ és la densitat de la mescla a tractar (kg/m^3)

1. Part cilíndrica

- A pressió interna

$$t = \frac{P \cdot R}{S \cdot E - 0,6 \cdot P} + C_1 + C_2$$

On:

t és el gruix a la pressió de disseny interna (mm)

P és la pressió de disseny interna (bar)

R és el radi intern del cilindre (mm)

S és el límit elàstic del material (1450 bar). S'ha considerat aquest valor tenint en compte el material utilitzat AISI 304 i que aquest pugui suportar una temperatura de disseny de fins a 100°C.

$E = 0,85$ és el factor de soldadura

$C_1 = 2$ mm és la tolerància a la corrosió

$C_2 = 0$ mm és la tolerància a la fabricació

2. Tapa torisfèrica

- A pressió interna. En aquest cas, aquesta part no queda coberta per la camisa.

$$t = \frac{0,885 \cdot P \cdot L}{S \cdot E - 0,1 \cdot P} + C_1 + C_2$$

On:

L és el radi de l'esfera que formaria que és igual al radi intern del cilindre (mm) i els altres paràmetres iguals al càlcul anterior.

3. Tronc cònic

- A pressió interna

$$t = \frac{P \cdot D}{2 \cdot \cos \alpha \cdot (S \cdot E - 0,6 \cdot P)}$$

On:

t en aquest cas és el gruix en polzades que després es passarà a mm, a la pressió de disseny interna.

P és la pressió de disseny interna (psi)

D és el diàmetre major intern del con (polzades)

S és el límit elàstic del material (psi)

$E = 0,85$ és el factor de soldadura

$\alpha = 30^\circ$ és l'angle representat l'esquema de la forma del cristal·litzador

Quan ja s'ha determinat el gruix necessari per cada part es corregeix aquest resultat per prevenir i compensar els possibles efectes de la corrosió i els possibles errors de fabricació. D'aquesta manera, es suma 2 mm en cada un dels gruixos obtinguts.

A més, s'ha tingut en compte pel primer cristal·litzador (bibliogràficament *Coulson*) que per els equips amb un diàmetre entre 1 i 2 m, el gruix recomanat és 7 mm, tot i el valor de t calculat ser menor.

Els gruixos obtinguts ja corregits són els següents:

Gruix part \ Equip	Cristal·litzador CR-401b	Cristal·litzador CR-402b	Recristal·litzador CR-403b
Cilíndrica (mm)	7	5	5
Tronc cònic (mm)	7	3	3
Tapa torisfèrica (mm)	3	3	3

Taula 11.10.1.h. Gruixos de parets de les parts dels cristal·litzadors

• Càlcul del pes dels equips

Es calcula el pes de l'equip buit, és a dir, la suma de les tres parts que el constitueixen i considerant que la densitat del material utilitzat (AISI 304) és 7890 kg/m³.

Per la part cilíndrica es determina tal i com s'ha fet en els tancs d'emmagatzematge i per la tapa torisfèrica es segueix el mateix procediment explicat en el reactor.

El pes de la secció cònica es determina calculant prèviament el volum del tronc cònic amb els radis externs (V_{ext}) i amb els radis interns (V_{int}). La diferència entre aquests dos valors serà el volum real de la xapa de la tapa cònica ($V_{cònic}$) i multiplicant aquest per la densitat del material s'obté el pes d'aquesta part del cristal·litzador.

$$V_{ext} = \frac{1}{3} \cdot \pi \cdot h \cdot (R_{ext}^2 + r_{ext}^2 + R_{ext} \cdot r_{ext})$$

$$V_{int} = \frac{1}{3} \cdot \pi \cdot h \cdot (R_{int}^2 + r_{int}^2 + R_{int} \cdot r_{int})$$

$$V_{\text{cònic}} = V_{\text{ext}} - V_{\text{int}}$$

$$m_{\text{cònic}} = V_{\text{cònic}} \cdot \rho$$

On:

h és l'alçada del tronc cònic (m)

R i r són els radis gran i petit interns, respectivament (m)

R_{ext} i r_{ext} són els radis gran i petit externs, respectivament (m) que es calculen tenint en compte que $R/r_{\text{ext}} = R/r_{\text{int}} + 2 \cdot t$

$\rho = 7890 \text{ kg/m}^3$ és la densitat dels material AISI 304 (kg/m^3)

$m_{\text{cònic}}$ és la massa total de la secció cònica (kg)

Per el primer cristal·litzador de paracetamol s'ha considerat que l'agitador juntament amb el seu motor pesa uns 400 kg. En el cas del segon cristal·litzador s'ha suposat un pes de 200 kg. En el pes de l'equip no es té en compte la mitja canya, però si que es té en compte el valor aproximat de l'agitador junt amb el seu respectiu motor. En el recristal·litzador s'ha considerat un pes d'agitador més motor de 150 kg.

El pes de l'equip en operació es calcula:

$$\text{pes equip en operació} = \text{pes equip buit} + V_{\text{mescla}} \cdot \rho_{\text{mescla}}$$

En la taula es resumeixen els pesos dels equips buits i en operació:

Equip	Pes equip buit (kg)	Pes equip en operació (kg)
CR-401b	1173,88	5527,746
CR-402b	256,59	1620,67
CR-403b	175,2	525,2

Taula 11.10.1.i. Pesos cristal·litzadors

11.11. DISSENY DELS CICLONS

11.11.1 Disseny funcional dels *filtres nucha* i dels ciclons

Es disposarà de 3 ciclons que serviran per realitzar de manera automàtica el buidat del paracetamol després de l'assecat en els filtres *nucha* i també facilitarà el transport fins a les sitges d'emmagatzematge. Aquest buidat es realitza fent el buit amb nitrogen que, a més, serà el fluid gasós utilitzat en aquest equip, evitant malmetre el producte i la seva oxidació per contacte amb l'aire.

La funció del **filtre nucha** és separar el sòlid i assecat-lo completament utilitzant condicions controlades de buit, pressió i temperatura. Aquests treballen en discontinu, per aquest motiu es disposa de 3 nuchas que operaran alternativament. Quan la primera estigui carregant, la segona es trobarà en funcionament i la tercera descarregant. Els corrents d'entrada a aquests equips són: sortida de sòlid de la centrífuga CT-401b, CT-402b i la sortida de magma del recristal·litzador CR-403b.

El seu disseny és completament tancat, evitant tot possible contacte amb l'atmosfera, fet que el fa idoni per a la filtració i l'assecatment d'aquest producte farmacèutic. El filtre Nucha treballa a pressió per batch i bàsicament consisteix en un equip dissenyat a pressió i a buit, amb una tela filtrant al seu interior. El recipient té una brida en la seva part inferior que permet desmuntar els fons inferior i incorpora un sistema especial d'agitació, reversible i d'altura regulable, que permet realitzar totes les operacions necessàries dintre de la fase de filtrat: preparació, suspensió, dissolució, allisat, compactat, esprésmer, remoure i rascat durant la descàrrega.

La seqüència típica de funcionament comença amb la càrrega del producte, que en el cas dels filtres nucha utilitzats i la quantitat de producte a entrar tarda 1,5 hores. En aquest temps es va formant la *torta* de productes sobre el filtre. Seguidament es pressuritza el recipient per forçar el filtrat del producte. En el cas dels filtres utilitzats i pels compostos presents, aquesta etapa dura 2 hores. Seguidament es procedeix a la descàrrega automàtica mitjançant l'aspiració i el buit a través del cicló, que tarda 1 hora a realitzar-se .

Els filtre nucha utilitzats són del model NUI-2.400-450 subministrats per la casa INGOR (Industrial Equipment Custom Manufactured). Aquests són equips dissenyats per realitzar de

manera encadenada i automàtica les etapes de filtració, rentat i secat en una sola unitat. El material és AISI 304.

La seva capacitat és de 6000 litres amb una superfície de $4,50 \text{ m}^2$, un diàmetre de 2,4 m i una alçada de 0,5 m. Pel seu funcionament requereix una potència de 18,7 KW. A partir de la capacitat màxima de 6000 litres i sabent el cabal total que surt per hora, s'ha calculat que es tarda una hora i mitja en carregar tota una nucha. També s'han realitzat els càlculs per saber quanta estona d'operació es requereix, resultant aquesta d'aproximadament de dos hores i una hora per descarregar el sòlid mitjançant l'aspiració del buit. Per aquest motiu es requereixen 3 filtres nuchas i en conseqüència 3 ciclons. D'aquesta manera quan la primera està operant, la segona comença a carregar i quan acaba de carregar la segona, la tercera comença a omplir-se. Quan la primera ja ha acabat la descarrega, coincideix amb el moment en que aquest ha de tornar a iniciar-se la càrrega.



Figura 11.11.1. Filtre nucha NUI-2.400-450

El nitrogen entra al filtre nucha amb una pressió de 7 bars a través d'una canonada que fa de col·lector amb uns bufadors que injecten el nitrogen amb tres tipus d'entrada. El nitrogen s'utilitza bàsicament en l'etapa de descàrrega.

Les tres línies d'entrada de nitrogen als filtres nucha són:

- ✓ *Línia de compensació:* és l'encarregada d'entrar el nitrogen que omple el filtre.
- ✓ *Línia de fluidització:* és l'encarregada de provocar l'aspiració i l'arrossegament del producte. En aquesta línia el nitrogen juntament amb l'efecte venturi són els

encarregats que el producte passi a través de la vàlvula de sortida, passant a la línia d'extracció.

- ✓ *Línia de turbulència:* és l'encarregada de bufar de manera seqüencial nitrogen a pressió i cabal alt per a poder elevar la torta de sòlid que pugui haver quedat encara incrustat, evitant així qualsevol tipus de neteja manual.

Com que la descàrrega s'efectua utilitzant nitrogen s'ha de disposar d'un dipòsit pulmó per garantir el cabal i la pressió en aquest moment. El nitrogen entra al filtre *nucha* a través d'una canonada que fa de col·lector amb uns bufadors creant una turbulència i fluïdització que ajuda a aspirar el producte. També es disposa d'una bomba de buit que serà la que aspirarà el paracetamol des de les *nuchas* a través dels ciclons. Com ja s'ha comentat la mida de partícula mitjà és de 200 µm, per tant, aquest tipus d'equip és molt adequat, tant per les condicions de treball, com per disseny, alta eficiència i poc requeriment d'espai.

11.11.2 Dimensionament i disseny mecànic dels ciclons

El procediment seguit pel disseny d'aquests equips ha estat el següent:

1. **Escollir el tipus de cicló:** s'ha decidit tipus Zenz, per tant, les relacions geomètriques que haurà de complir són:

$$\begin{array}{lll} a/D = 0,5 & D_e/D = 0,5 & B/D = 0,25 \\ b/D = 0,25 & h/D = 2,0 & k = 0,729 \\ s/D = 0,75 & H/D = 4,0 & K = 34,7 \end{array}$$

També s'ha tingut en compte que la longitud natural del cicló (*l*), és a dir, la longitud (punt) en que es produeix la inversió del flux de gas ha de trobar-se entre *h* i *H*: $h < l < H$

$$l \text{ és pot estimar: } l = 2,3 \cdot D_e \cdot \left[\frac{D^2}{b \cdot a} \right]^{1/3}$$

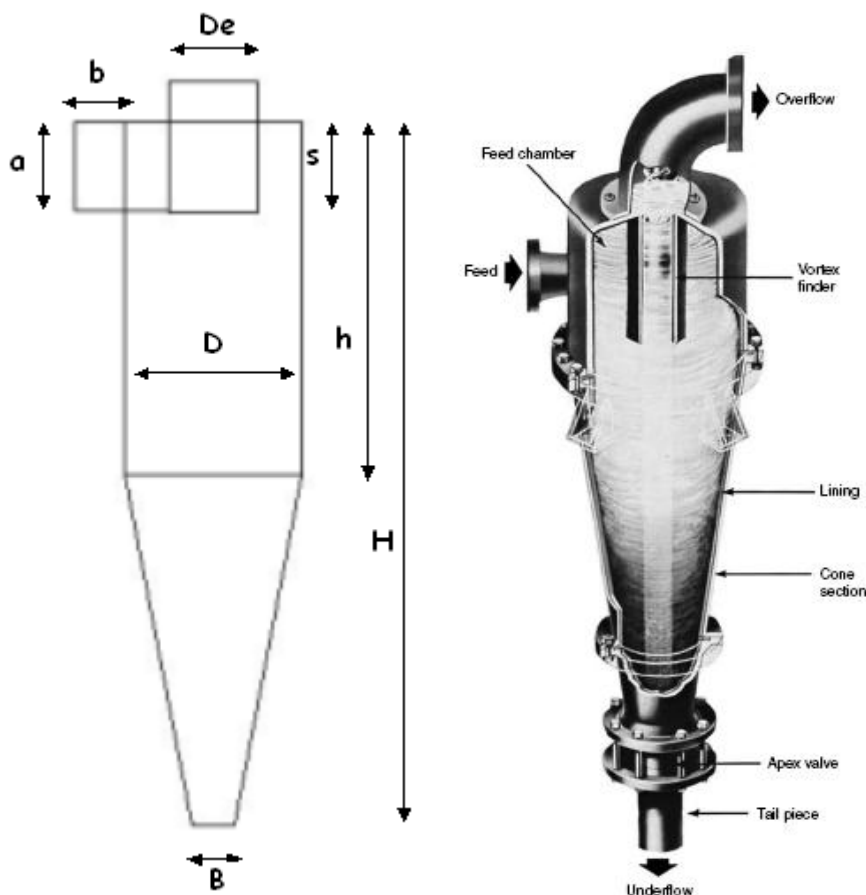


Figura 11.11.2.a. Esquema de les dimensions i parts d'un cicló

2. **Condicions d'operació:** L'equip treballarà a pressió de buit (0,605 atm) i a una temperatura mitjana d'operació de 20 °C (aproximadament a temperatura ambient).
3. **Suposar un diàmetre D del cicló** i iterant fins a aconseguir una eficàcia igual o superior al 98% i unes pèrdues de càrrega (ΔP) iguals o menors a 2500 N/m². Així doncs, s'ha seguit el següent procediment de càlcul
 - Calcular les **dimensions del cicló** (a, b, s, D_e, h, H, B) a partir del diàmetre suposat i les relacions geomètriques anteriorment establertes.
 - Calcular l'**exponent del vòrtex**:

$$n = 1 - \left(1 - 0,67 \cdot D^{0,14}\right) \left(\frac{T}{283}\right)^{0,3}$$

On:

D és el diàmetre del cicló (m)

T és la temperatura de treball (°K)

- Calcular l'àrea transversal del flux d'entrada:

$$A = a \cdot b \quad (\text{m}^2)$$

- Calcular la velocitat del gas d'entrada:

$$u = \frac{Q}{A} \quad (\text{m/s}) \quad \text{On } Q \text{ és el cabal de gas (N}_2\text{) d'entrada (m}^3\text{/s)}$$

- Calcular l'eficàcia suposant com a mida de partícula la mitjana considerada en els cristal·litzadors ($L_m = 200 \mu\text{m}$):

$$\eta = 1 - \exp \left[-2 \cdot \left(\frac{(1+n) \cdot Q \cdot K \cdot \rho_p \cdot L_m^2}{D^3 \cdot 18 \cdot \mu} \right)^{\frac{1}{2n+2}} \right]$$

On:

$\mu = 1,75 \cdot 10^{-5} \text{ kg/(m} \cdot \text{s)}$ és la viscositat del nitrogen gas a la temperatura de treball

$\rho_p = 1293 \text{ kg/m}^3$ és la densitat de les partícules sòlides de paracetamol

$L_m = 0,0002 \text{ m}$ és la mida mitjana considerada de partícules (diàmetre mig)

D és el diàmetre, n és l'exponent del vòrtex i K és un dels paràmetres de disseny

- Lectura de l'eficàcia corregida (η_c). Aquesta dependrà de la fracció recuperada calculada anteriorment (eficàcia) i de la concentració de partícules en el gas. Es llegeix gràficament en la **Figura 2**.
- Calcular la pèrdua de càrrega (ΔP), ja que aquesta contribueix a l'expansió del gas a l'entrada, pèrdues d'energia cinètica en la trajectòria helicoidal, fricció sobre les parets i recuperació d'energia cinètica en forma de pressió a la sortida.

$$\Delta P = \zeta \cdot \frac{\rho \cdot u^2}{2} \quad (\text{N/m}^2)$$

$$\zeta = 16 \cdot \frac{a \cdot b}{D_e^2}$$

On $\rho = 1,166 \text{ kg/m}^3$ és la densitat del nitrogen gas a la temperatura de treball.

- Calcular la **pèrdua de càrrega corregida**, tenint en compte la concentració de partícules:

$$\Delta P_c = \Delta P \cdot \frac{1}{1 + 0,0086 \cdot \sqrt{C}}$$

On C és la concentració de partícules en g/m^3 .

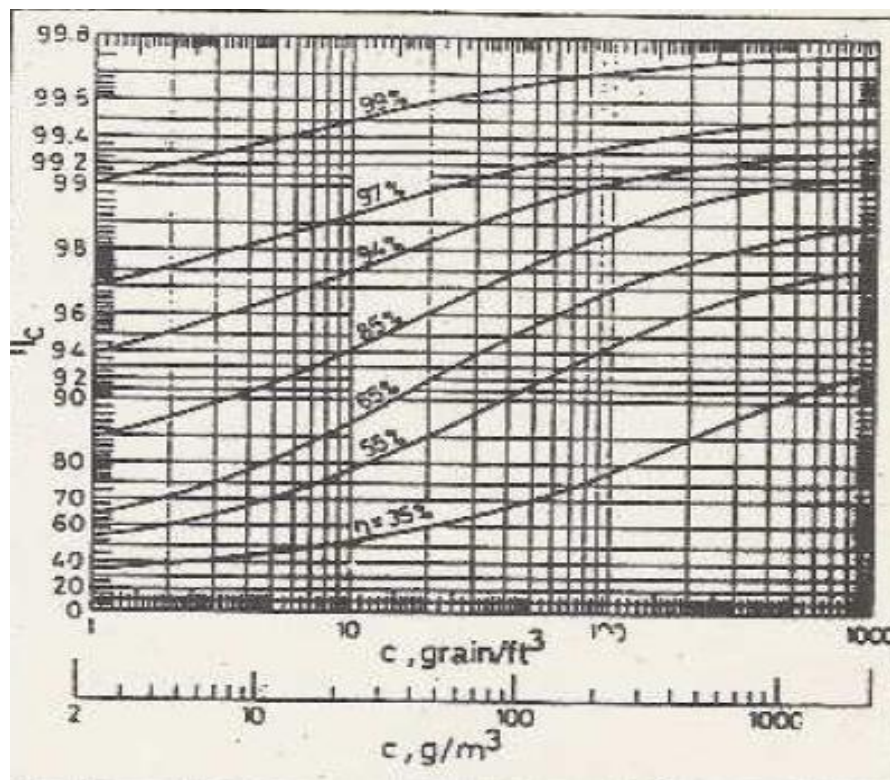


Figura 11.11.2.b. Lectura de l'eficàcia corregida tenint en compte la interacció entre les partícules

4. Les dimensions, pèrdua de càrrega i eficàcia corregida finalment obtingudes són:

Dimensions	(m)
D	0,8
a	0,4
b	0,2
s	0,6
De	0,4
h	1,6
H	3,2
B	0,2
k	0,729
K	34,7
I	1,84

Taula 11.11.2.a. Dimensions i paràmetres dels ciclons CC-501/503 tipus Zenz

T (°K)	293
P (atm)	0,605
Q (m ³ /s)	0,243
C (g/m ³)	992,77
A (m ²)	0,08
u (m/s)	3,04
Cabal de N ₂ necessari (m ³ /h)	875,79

Taula 11.11.2.b. Condicions de treball i d'operació

Eficàcia	93,4
Eficàcia corregida	99,2
ξ	8
ΔP (N/m²)	26,14
ΔP corregida (N/m²)	20,57

Taula 11.11.2.c. Eficàcia i pèrdua de càrrega

Propietats del nitrogen gas 613 mbar	
Densitat (kg/m ³)	0,70556
Viscositat (Pa·s)=kg/(m·s)	1,75E-05
PM (kg/kmol)	28,0134

Taula 11.11.2.d. Propietats del nitrogen gas utilitzades en els càlculs

Cal dir que pel càlcul del cabal de nitrogen necessari s'ha assumit un cabal d'aquest constant durant tot el procés d'aspiració, sense tenir en compte les diferents fases. És a dir, el cabal de nitrogen utilitzat és el cabal que realment s'utilitza per l'aspiració sent aquest de 875,79 m³/h.

- **Disseny mecànic**

Els ciclons com es pot observar en la **Figura 11.11.2.a.** estan formats per una part cilíndrica i una part cònica, per tant, s'ha calculat el gruix de la xapa de cada secció de l'equip. El material usat és l'AISI 304 i les condicions d'operació de temperatura i pressió són 20 °C i 613 mbar, respectivament.

A diferència dels equips explicats anteriorment en el manual de càlcul, els ciclons no treballen a pressió atmosfèrica sinó que treballen al buit, a 0,605 atm. Per tant, s'ha calculat el gruix de la xapa tant amb el mètode ASME a pressió interna com a pressió externa.

1. **Pressió interna:** es realitza de la mateixa manera que s'ha realitzat en els altres equips, tenint en compte la part cònica i la part cilíndrica, per la pressió interna, és a dir,

613 mbar i sobredimensionant un 15 % la pressió de disseny és de 0,705 bar. Per a pressió interna s'ha trobat un gruix de 3 mm.

2. **Pressió externa:** s'efectua un sistema iteratiu prenent com a valor inicial d'iteració el gruix calculat prèviament a pressió interna.

Es calcula el gruix de la **paret cilíndrica a pressió externa** i el gruix de la **paret de la part cònica** també a **pressió externa**.

S'efectua un sistema iteratiu prenent com a valor d'iteració el gruix calculat prèviament a pressió interna. Es calcula el diàmetre extern com:

$$D_0 = D_i + 2t \text{ (mm)}$$

On:

D_i és el diàmetre intern = 0,8 m.

t és el gruix suposat (mm)

La longitud L és la longitud de la part cilíndrica, és a dir, $h=1,6$ m.

Es calcula les relacions següents: L/D_0 i D_0/t_{int}

On: $t_{int} = t_{suposada} - C_1$, sent $C_1=2$ mm el gruix afegit per a la corrosió.

D'aquesta manera es pot trobar el *factor A* a la **figura 11.11.2.c.**. Coneixent la temperatura de disseny 68 F (20 °C) i sabent el mòdul d'elasticitat per aquest material (**taula 11.11.2.e.**).

Materials	E (GPa)	ν
Sílíce amorfa (Patrón de calibración equipos de nanoindentación CSM instruments)	72,6	0,17
Zafiro policristalino	430-460	0,21-0,27
Vidrio (Patrón de calibración equipos de indentación Fischerscope GmB)	70	—
Aluminio 1100	68,9	0,33
Aluminio de alta pureza (99,999%)	68	0,34
Titanio	107-113	0,34
Cobre electrolítico	117	0,35
Acero patrón (Patrón de calibración de microdureza: <i>Sahi Oio Hyogo Japan standardized block for hardness, 700 HV</i>)	210-220	0,27-0,30
Monocristal de silicio	130-160	0,17-0,28
Acero inoxidable AISI 304	187-200	0,29
Acero para herramienta AISI M2	190-210	0,27-0,30
Capa de nitruro de titanio depositada sobre acero AISI M2 (TiN-M2)	400-460	0,21-0,25
Capa de nitruro de titanio depositada sobre acero AISI 304 (TiN-304)	400-460	0,21-0,25

Taula 11.11.2.e. Mòdul d'elasticitat per diferents materials

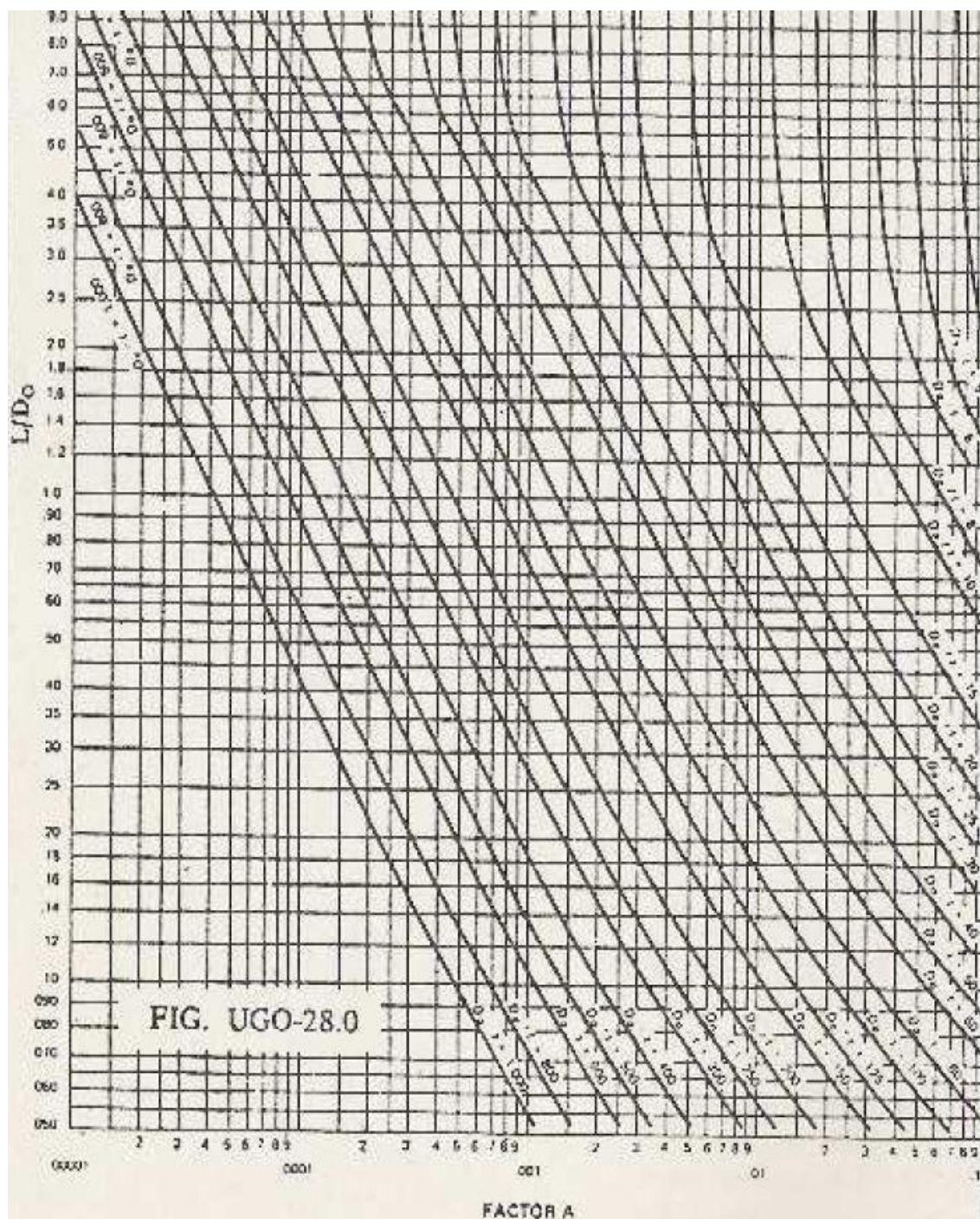


Figura 11.11.2.c. Factor A en funció de L/D_0 i D_0/t .

A continuació es pot calcular P_a i si aquesta supera la diferència de pressió entre la pressió externa i la interna, la iteració es dona per finalitzada. És a dir, en aquest cas, P_a haurà de ser superior a 0,395 atm (1atm-0,605atm).

Si no es compleix, es suposa un gruix t més gran de xapa, tornant a calcular els paràmetres per tornar a trobar el nou valor del factor A.

- Per la **part cilíndrica** s'utilitza:

$$Pa = \frac{2 \cdot A \cdot E}{3 \cdot \left(\frac{D_0}{t_{util}} \right)} \text{ (bar)}$$

- Pe la **part cònica** s'utilitza:

$$Pa = \frac{2 \cdot A \cdot E}{3 \cdot \left(\frac{D_0}{t_{util}} \right)} \text{ (bar)}$$

En el cas de la part cònica, L serà la longitud de la part cònica és (H-h) =1,6 m també.

El gruix resultant que s'ha donat per correcte en les dos parts és de 6 mm de gruix, tenint en compte ja el sobre espessor de corrosió.

11.12. DISSENY DE LES SITGES DE PARACETAMOL

11.12.1 Disseny funcional de les sitges

Cal especificar que tot el paracetamol produït a la planta serà emmagatzemat en sitges, i posteriorment es presentarà en forma sòlida en bosses de polietilè de 25Kg dins de bidons de cartró. Pel disseny d'aquestes sitges és necessari saber la producció total de paracetamol, per així poder calcular el volum produït en 3 dies, d'aquesta manera ens assegurem que per qualsevol problema amb la recollida dels camions, es tingui suficient espai per emmagatzemar el producte. El cabal màssic de paracetamol és de 20.997,48Kg/h i conté 2,52Kg/h d'aigua que no ha pogut ser eliminada dels assecadors. La producció total és doncs de 21000Kg/h. Aleshores el volum necessari és de:

$$\frac{21000Kg}{dia} \cdot \frac{1m^3}{1263Kg} \cdot 3dies = 49,881m^3$$

Amb aquesta dada podem saber els camions necessaris per a la recollida de paracetamol. Suposem que els camions tenen una capacitat de 23000Kg, els camions necessaris cada tres dies són:

$$\frac{21000Kg}{dia} \cdot 3dies \cdot \frac{1camió}{23000Kg} = 2,74 camions \approx 3 camions$$

Si en una bossa de polietilè hi caben 25Kg, necessitarem 840 bosses per dia. Aquestes es troben dins de bidons. Per saber el nombre de bosses que hi caben per bidó, considerem que els bidons tenen una alçada de 1,4m i un diàmetre de 0,51m. Aleshores calculem el volum del bidó:

$$V_{bidó} = \frac{\pi}{4} \cdot 0,51^2 \cdot 1,4 = 0,286m^3$$

Sabem que en una bossa hi caben 0,0198m³, i amb aquesta dada tenim les bosses que tenim per bidó.

$$N^{\circ} \frac{bosses}{bidó} = \frac{0,286m^3 bidó}{0,0198m^3 bossa} = 14,44 \approx 14 bosses/bidó$$

$$N^{\circ} bidons = \frac{840bosses}{14 \frac{bosses}{bidó}} = 60 bidons$$

Ja sabem que cada camió recollirà 60 bidons amb 14 bosses a cada un de 25 Kg.

- **Dimensionament de la sitja**

Ens cal saber el nombre de sitges necessàries per a l'emmagatzematge del volum total paracetamol. La forma geomètrica d'aquestes serà cònica a la part superior, cilíndrica a la central i també cònica a la part inferior amb una obertura per a poder descarregar el producte. Per a saber el nombre de sitges hem de calcular el volum d'una sitja, i per tant el volum de les tres parts que el formen.

Volum del cilindre: $V_{cilindre} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{cil}^2 \cdot H_{cil} = \frac{\pi}{4} \cdot 2^2 \cdot 4 = 12,566m^3$

On:

D_{cil} és el diàmetre del cilindre [m]

H_{cil} és l'alçada del cilindre [m]

Volum del con: Primer calculem l'alçada segons la inclinació que es vulgui segons Pitàgores.

$$H_{con} = \frac{D_{cil}^2}{2} \cdot \tan(\alpha) = \frac{2^2}{2} \cdot \tan(25^\circ) = 0,466m^3$$

$$V_{con} = \frac{\pi}{3} \cdot \frac{D_{cil}^2}{2} \cdot H_{con} = \frac{\pi}{3} \cdot \frac{2^2}{2} \cdot 0,466 = 0,488m^3$$

On:

D_{cil} és el diàmetre del cilindre [m]

H_{con} és l'alçada del con [m]

α és l'angle entre la diagonal del con amb l'horitzontal

Volum de la tolva: $H_{tolva} = \left(\frac{D_{cil}}{2} - \frac{D_{tolva}}{2} \right) \cdot \tan(\beta) = \left(\frac{2}{2} - \frac{0,15}{2} \right) \cdot \tan(30^\circ) = 0,534m^3$

$$V_{tolva} = \frac{\pi}{3} \cdot \left(\frac{D_{cil}^2}{2} + \frac{D_{tolva}^2}{2} + \frac{D_{tolva} \cdot D_{cil}}{4} \right) \cdot H_{tolva} = \frac{\pi}{3} \cdot \left(\frac{2^2}{2} + \frac{0,15^2}{2} + \frac{0,15 \cdot 2}{4} \right) \cdot 0,534 = 0,604m^3$$

On:

D_{cil} és el diàmetre del cilindre [m]

D_{tolva} és el diàmetre de la tolva [m]

H_{tolva} és l'alçada de la tolva [m]

β és l'angle entre la diagonal de la tolva amb l'horitzontal

Ara ja sabem que el volum total de una sitja seria la suma de tots els volums, i també es pot saber l'alçada de la mateixa manera.

$$V_{sitja} = V_{cilindre} + V_{con} + V_{tolva} = 17,8m^3$$

$$H_{sitja} = H_{cilindre} + H_{con} + H_{tolva} = 5m$$

Tot i així, l'alçada total de la sitja seria de 6,5m ja que aquesta ha d'estar elevada perquè els operaris puguin descarregar el producte i dipositar-lo en bosses de polietilè de 25 Kg, i se suposa una distància 1,5m d'alçada perquè aquests puguin treballar correctament.

Un cop tenim el volum total d'una sitja ja podem calcular el nombre de les necessàries:

$$N^{\circ}sitges = \frac{V_{necessari}}{V_{1sitja}} = \frac{49,881m^3}{17,8m^3} = 2,81 \approx 3 \text{ sitges}$$

S'obté que amb 3 sitges podrem emmagatzemar la producció de paracetamol de 3 dies, i cada sitja tindrà un % d'ocupació que es calcula de la següent manera:

$$\% \text{ Ocupació} = \frac{49,881m^3}{\frac{17,8m^3}{sitja} \cdot 3sitges} \cdot 100 = 93,41\%$$

$$V_{sitja \text{ ocupat}} = \frac{93,41}{100} \cdot 17,8m^3 = 16,627m^3$$

- **Disseny mecànic**

Pel càlcul de l'espessiment de la sitja hem considerat que el material utilitzat serà AISI-304. La pressió de disseny és de 3,01bar i la temperatura de disseny de 40°C.

✓ Càlcul del gruix de la paret de la sitja, hem utilitzat la següent equació:

$$t = \frac{P \cdot R}{S \cdot E - 0,6 \cdot P} + C_1 + C_2 = \frac{3,01 \cdot 1000}{1296 \cdot 0,85 - 0,6 \cdot 3,01} + 1 = 3,74mm \approx 4mm$$

On:

t és el gruix de la paret en [mm]

P és la pressió de disseny interna en [bar]

R és el radi intern del cilindre en [mm]

S és el límit elàstic en [bar], S=18800psi.

E és el factor de soldadura, radiografiat parcial.

C1 és la tolerància a la corrosió en [mm]

C2 és la tolerància a la soldadura en [mm]

El gruix escollit per la paret cilíndrica és de 4mm.

- ✓ Càlcul del gruix del fons superior cònic, l'equació és una altra:

$$t = \frac{P \cdot D}{2 \cdot \cos(\alpha) \cdot (S \cdot E - 0,6 \cdot P)} + C_1 + C_2 = 4,325mm \approx 6mm$$

On:

t és el gruix del fons superior cònic en [mm]

P és la pressió de disseny interna en [bar]

D és el diàmetre intern del cilindre en [mm]

S és el límit elàstic en [bar], S=18800psi.

E és el factor de soldadura, radiografiat parcial.

C₁ és la tolerància a la corrosió en [mm]

C₂ és la tolerància a la soldadura en [mm]

α és l'angle que forma la diagonal del con amb la horitzontal

El gruix escollit pel fons superior cònic és de 6mm.

- ✓ Càlcul del gruix del fons inferior cònic, l'equació és la mateixa:

$$t = \frac{P \cdot D}{2 \cdot \cos(\alpha) \cdot (S \cdot E - 0,6 \cdot P)} + C_1 + C_2 = 1,258mm \approx 2mm$$

On:

t és el gruix del fons inferior cònic en [mm]

C₁ és la tolerància a la corrosió en [mm]

C₂ és la tolerància a la soldadura en [mm], 10% del gruix.

α és l'angle que forma la diagonal del con amb la horitzontal

El gruix escollit pel fons inferior és de 2mm.

Ara ja es coneixen els valors dels gruixos d'espessiment i ja podem calcular el pes de la sitja.

Pel càlcul del pes de l'equip, primer calculem el pes de la sitja buida:

- ✓ Càlcul del pes del fons inferior cònic:

$$P_{fons} = A_{cil} \cdot t \cdot \rho_{acer} = 3,15 \cdot 0,002 \cdot 7930 = 50,025Kg$$

On:

P_{fons} és el pes del fons inferior cònic en [Kg]

A_{cil} és l'àrea del cilindre en [mm]

ρ_{acer} és la densitat de l'acer, 7930kg/m³

t és el gruix del fons inferior cònic

El pes del fons inferior cònic és de **$P_{fons} = 50,025Kg$** .

- ✓ Càlcul del pes del sostre superior cònic: $P_{sostre} = A_{con} \cdot t \cdot \rho_{acer} = 166,737Kg$

On:

P_{sostre} és el pes del sostre inferior cònic en [Kg]

A_{con} és l'àrea del con en [mm], $A_{con} = \pi \cdot g \cdot r$, on g és la generatriu del con

ρ_{acer} és la densitat de l'acer, 7930kg/m³

t és el gruix del sostre cònic

El pes del sostre cònic és de **$P_{sostre} = 166,737Kg$** .

- ✓ Càlcul del pes de la paret cilíndrica: $P_{paret} = A_{cil} \cdot H_{cil} \cdot \rho_{acer} = 800,399Kg$

On:

P_{paret} és el pes de la paret cilíndrica en [Kg]

A_{cil} és l'àrea del cilindre en [mm], ρ_{acer} és la densitat de l'acer, 7930kg/m³

H_{cil} és l'alçada del cilindre en [m]

El pes de la paret cilíndrica és de **$P_{paret} = 800,399Kg$** .

Al tenir tots els pesos de totes les parts de la sitja es pot trobar el pes total de l'equip buit

$$P_{total} = P_{fons} + P_{sostre} + P_{paret} = 1017,162Kg$$

Per tant, el pes total de l'equip buit és de **1017,162 Kg**.

- ✓ Càlcul del pes de l'equip amb aigua:

$$P_{aigua} = P_{equip} + V_{aigua} \cdot \rho_{aigua} = 18773,90Kg$$

On P_{equip} és el pes de l'equip buit en [Kg]

V_{aigua} és el volum que ocupa l'aigua, $V_{aigua} = \left(\frac{\pi}{4}\right) \cdot D_{cil}^2 \cdot H_{cil}$ en m³.

ρ_{aigua} és la densitat de l'aigua, 1000kg/m³.

Per tant, s'obté un pes amb aigua de **$P_{aigua} = 18773,90Kg$** .

- ✓ Càlcul del pes de l'equip amb paracetamol:

$$P_{paracetamol} = P_{equip} + V_{paracetamol} \cdot \rho_{paracetamol} = 23443,93Kg$$

On P_{equip} és el pes de l'equip buit en [Kg]

$V_{\text{paracetamol}}$ és el volum que ocupa el producte, $V_{\text{producte}} = \left(\frac{\pi}{4}\right) \cdot D_{\text{cil}}^2 \cdot H_{\text{cil}}$ en m³.

$P_{\text{paracetamol}}$ és la densitat del paracetamol, 1263kg/m³.

Per tant, s'obté un pes amb aigua de $P_{\text{paracetamol}} = 23443,93\text{Kg}$.

A continuació es mostra una taula amb les dades del disseny mecànic calculades:

Material	AISI 304
Pressió d'operació [bar]	1,0132
Pressió de disseny [bar]	3,0132
Gruix Con Superior [mm]	6
Gruix Cilindre [mm]	4
Gruix Tolva Inferior [mm]	2
Pes equip buit [kg]	1017,162
Pes equip amb aigua [kg]	18773,90
Pes equip producte[kg]	23443,93

Taula 11.12.1. Resum disseny mecànic de les sitges d'emmagatzematge

11.13. DISSENY I ELECCIÓ DE BOMBES

11.13.1 Disseny funcional de les bombes

- **Aplicació del balanç d'energia mecànica**

La funció principal de la bomba és la de proporcionar al fluid la pressió necessària per que es desplaci entre dos punts de la planta. Per determinar la potència necessària de la bomba es realitza un balanç d'energia mecànica entre els punts inicial i final de desplaçament del fluid, tenint en compte també les pressions inicials i finals de la canonada.

$$\frac{\Delta P}{\rho} + g \cdot (Z_2 - Z_1) + \frac{1}{2\alpha} \cdot (v_2^2 - v_1^2) = \hat{w} - e_v$$

On:

ΔP : Increment de pressions entre els punts 1 i 2 (P2-P1).

ρ : Densitat del fluid que circula (kg/m³).

g: Acceleració de la gravetat (m/s²).

\hat{w} : Treball de la bomba per unitat de massa. (J/Kg).

(Z₂-Z₁): Increment d'alçada entre els dos punts.

e_v: Pèrdues de càrrega totals (Trams rectes i accidents)

(v₂² - v₁²): Increment de velocitat del fluid entre els dos punts (m/s).

α : Constant que depèn del tipus de flux (laminar = 0,5 turbulent =1)

En el recorregut del fluid es considera que la velocitat del fluid a través de la canonada és constant, per tant, el terme d'energia cinètica del balanç queda anul·lat.

- **Càlcul de les pèrdues de càrrega en els accidents**

Durant el recorregut el fluid experimenta una pèrdua de càrrega en diferents accessoris o accidents que distorsionen el recorregut del fluid. Els accidents característics d'una instal·lació com aquesta són colzes, vàlvules, filtres, etc.

Existeixen dos mètodes generalitzats per determinar les pèrdues de càrrega en accidents, en aquest cas s'utilitza el mètode dels coeficients de pèrdues (K).

$$e_v \text{ accidents} = K \cdot \frac{v^2}{2}$$

On:

v és la velocitat del fluid per la canonada i K el valor del paràmetre que depèn dels diferents accessoris tal i com s'aprecia a la **taula 11.13.1.a.** següent:

TABLE 6-4 Additional Frictional Loss for Turbulent Flow through Fittings and Valves^a

Type of fitting or valve	Additional friction loss, equivalent no. of velocity heads, K
45° ell, standard ^{b,c,d,f}	0.35
45° ell, long radius ^f	0.2
90° ell, standard ^{b,c,d,f,g,h}	0.75
Long radius ^{b,c,d,f}	0.45
Square or miter ^h	1.3
180° bend, close return ^{b,c,g}	1.5
Tee, standard, along run, branch blanked off ^g	0.4
Used as ell, entering run ^g	1.0
Used as ell, entering branch ^{g,h}	1.0
Branching flow ^{d,i,k}	1 ^l
Coupling ^{c,g}	0.04
Union ^g	0.04
Gate valve, ^{b,m} open	0.17
1/4 open ⁿ	0.9
1/2 open ⁿ	4.5
3/4 open ⁿ	24.0
Diaphragm valve, ^o open	2.3
1/4 open ⁿ	2.6
1/2 open ⁿ	4.3
3/4 open ⁿ	21.0
Globe valve, ^{c,m}	
Bevel seat, open	6.0
1/2 open ⁿ	9.5
Composition seat, open	6.0
1/2 open ⁿ	8.5
Plug disk, open	9.0
1/4 open ⁿ	13.0
1/2 open ⁿ	36.0
3/4 open ⁿ	112.0
Angle valve, ^{c,n} open	2.0
V or blowoff valve, ^{b,m} open	3.0
Plug cock ^g	
θ = 5°	0.05
θ = 10°	0.29
θ = 20°	1.56
θ = 40°	17.3
θ = 60°	206.0
Butterfly valve ^g	
θ = 5°	0.24
θ = 10°	0.52
θ = 20°	1.54
θ = 40°	10.8
θ = 60°	115.0
Check valve, ^{b,m} swing	2.0 ^l
Disk	10.0 ^l
Ball	70.0 ^l
Foot valve ^f	15.0
Water meter, ^h disk	7.0 ^l
Piston	15.0 ^l
Rotary (star-shaped disk)	10.0 ^l
Turbine-wheel	6.0 ^l

Taula 11.13.1.a. Coeficient K per diferents tipus d'accidents.

• Càlcul de les pèrdues de càrrega en els trams rectes

Les pèrdues de càrrega que experimenta el fluid en els trams rectes d'instal·lació són degudes a la fricció del fluid entre les parets de la canonada i a la turbulència d'aquest.

Aplicant un balanç macroscòpic de quantitat de moviment en el sistema s'obté la següent expressió.

$$e_v \text{ trams rectes} = 2 \cdot f \cdot \frac{L}{D} \cdot \langle v \rangle^2$$

On:

f és el factor de fricció de Fanning.

L és la longitud de la canonada (m).

D és el diàmetre intern de la canonada (m).

v és la velocitat a la que circula el fluid per l'interior de la canonada (m/s).

El factor de fricció de fanning depèn del Reynolds i de la rugositat relativa, paràmetre característic del material de la canonada.

Totes les canonades de la planta estan fabricades d'acer inoxidable, per tant, la rugositat relativa es determina dividint la rugositat absoluta entre el diàmetre intern de la canonada. En la següent taula es troben les rugositats absolutes dels materials més comuns de fabricació de canonades.

RUGOSIDAD ABSOLUTA DE MATERIALES			
Material	ε (mm)	Material	ε (mm)
Plástico (PE, PVC)	0,0015	Fundición asfaltada	0,06-0,18
Poliéster reforzado con fibra de vidrio	0,01	Fundición	0,12-0,60
Tubos estrados de acero	0,0024	Acero comercial y soldado	0,03-0,09
Tubos de latón o cobre	0,0015	Hierro forjado	0,03-0,09
Fundición revestida de cemento	0,0024	Hierro galvanizado	0,06-0,24
Fundición con revestimiento bituminoso	0,0024	Madera	0,18-0,90
Fundición centrífuga	0,003	Hormigón	0,3-3,0

Taula 11.13.1.b. Rugositat absoluta de diferents materials.

El Reynolds depèn del fluid que hi circula per la canonada i es calcula amb la següent equació adimensional:

$$Re = \frac{D \cdot \rho \cdot v}{\mu}$$

On:

D és el diàmetre de la canonada (m).

ρ és la densitat del fluid (Kg/m³).

μ és la viscositat del fluid (Kg/m·s).

Un cop determinat el Reynolds i la rugositat relativa, es determina el factor de fricció f amb la gràfica de Moody.

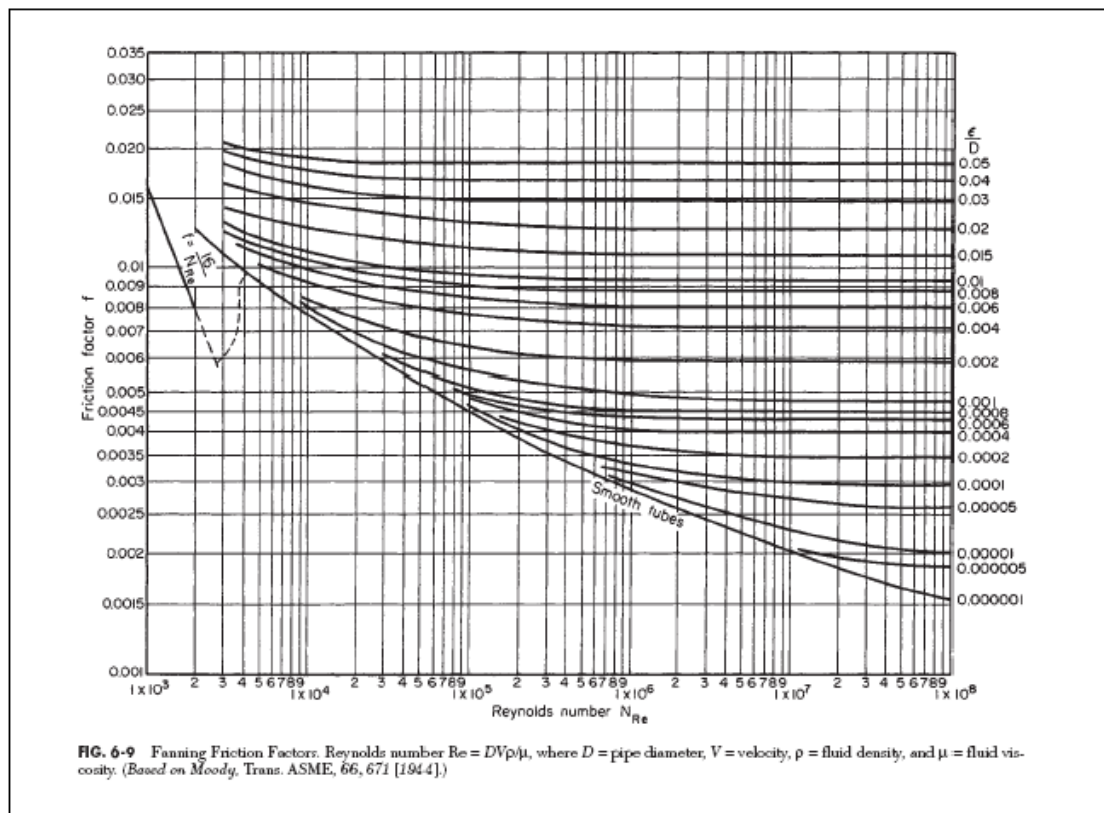


Figura 11.13.1.a. Gràfica de Moody per determinar el factor de fricció en funció del Reynolds i la rugositat relativa.

Les pèrdues de càrrega totals són el sumatori de les pèrdues de càrrega dels trams rectes més la dels accidents.

$$e_v \text{ totals} = e_v \text{ trams rectes} + e_v \text{ accidents}$$

- **Càlcul de la potència de la bomba**

Una cop determinades les pèrdues de càrrega totals i coneixent el terme d'energia potencial, es pot aïllar el treball de la bomba per unitat de massa.

La relació entre el treball de la bomba per unitat de massa i la potència d'aquesta és:

$$P \text{ teòrica} = \hat{W} \cdot m$$

On:

P és la potència de la bomba (W).

M és el cabal màssic que ha de tractar la bomba (Kg/s).

\hat{W} és el treball per unitat de massa (J/Kg).

El valor trobat és la potència teòrica de la bomba. Però tota l'energia produïda no és utilitzada per impulsar al fluid, sinó que una part es dissipa en forma de calor, fregament dels rotors de la bomba, etc. Per tant, utilitzant el factor de rendiment de la bomba es determina la potència real necessària. En aquest cas es fixa un valor estàndard del 65%. ($\eta = 0.65$)

$$P_{\text{real}} = \frac{P_{\text{teòrica}}}{\eta}$$

- **Càlcul del temps que realitza el buit les bombes de buit utilitzades en l'àrea 500**

Sabent el cabal que necessiten tractar les bombes de buit i el diàmetre nominal de les canonades que van a parar a les bombes de buit, juntament amb la capacitat dels equips els que se'ls realitza el buit (ciclons), es pot calcular el temps necessari de buit.

Per realitzar el càlcul també és necessari conèixer les pressions inicials i finals, és a dir, de la pressió atmosfèrica a quina pressió es vol baixar. En el cas dels ciclons aquesta pressió final és de 0,605 atm (613 mbar).

$$t = \frac{V \cdot \ln P_1}{Q \cdot \ln P_2}$$

On:

V és el volum de l'equip que es troba al buit en m³

Q_L és el cabal que es tracta (m³/min)

t és el temps requerit (min)

P₁ és la pressió inicial (1 atm)

P₂ és la pressió final (0,605 atm)

11.14. DISSENY DE VENTILADORS I COMPRESSORS

11.14.1. Disseny funcional de ventiladors i compressors

Per desplaçar fluids en estat gas s'utilitzen compressors, ventiladors o bufadors. Depenent de la diferencia de pressions entre l'entrada i la sortida de l'equip, és més apropiada la utilització d'un tipus o un altre.

- **Ventiladors:** Quan la relació de pressions entre la sortida i l'entrada és més petita que 1,1.
- **Bufadors:** Quan la relació de pressions entre la sortida i l'entrada es troba entre 1,1 i 3.
- **Compressors:** Quan la relació de pressions entre la sortida i l'entrada és major a 3.

Per transportar un fluid d'un lloc a un altre de la planta en estat líquid s'utilitzen bombes

- **Compressors**

Un compressor d'aire és un dispositiu mecànic accionat per un motor elèctric. L'energia elèctrica és transformada en energia mecànica la qual impulsa al fluid a una determinada velocitat i pressió.

Cal destacar que l'energia mecànica es transforma en cinètica en arribar al fluid. Com a conseqüència de produir-se un canvi important en la pressió del gas, també es produeix un canvi en la temperatura i la densitat del gas o vapor.

S'ha considerat que la compressió és politròpica alhora de realitzar els càlculs per determinar la potència de cada compressor utilitzant la següent expressió:

$$W_p = N \cdot \frac{\gamma}{\gamma - 1} \cdot \frac{Z \cdot R \cdot T}{PM} \cdot (r^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} - 1)$$

$$W = W_p \cdot m$$

On:

N és el nombre d'etapes del compressor

$$\gamma = C_p / C_v$$

PM és el pes molecular del fluid (kg/kmol)

R és la constant dels gasos (8.31 KJ/K·Kmol)

T és la temperatura del fluid

r és el factor de relació de pressions (P2/P1)

w és la potència real de l'equip (kJ/kg)

W_p és la potència de l'equip (kJ/kg)

m és el cabal màssic (kg/s)

$$W_p = N$$

- **Ventiladors i bufadors**

Per produir un petit increment de pressió sobre el gas s'utilitzen ventiladors o bufadors.

Tant el *bleacher* com la torre de refrigeració porten incorporat un ventilador per impulsar l'aire a través de l'equip.

La potència requerida pel ventilador utilitzat de la torre de refrigeració, en funció del cabal de líquid a tractar es troba entre 8 i 15 kW.

11.15. SERVEIS DE PLANTA

11.15.1. Electricitat

- **Estació transformadora**

Com s'ha comentat en l'apartat 1.7.1, la planta requereix una estació transformadora d'alta a baixa tensió. Els requeriments de la qual s'han calculat a partir de la potència total necessària. Així doncs, després d'haver calculat la potència requerida pel funcionament de cada equip s'ha calculat la potència total necessària i a aquesta se li ha aplicat un coeficient de simultaneïtat del 70%, excepte en el cas dels agitadors que s'ha considerat un 100% de simultaneïtat.

$$KVA = \frac{\text{potència requerida}}{\cos \varphi} = \frac{kW}{0,8} = KVA$$

- **Dimensionament dels cables**

Seguidament, pel dimensionament dels cables cal realitzar el càlcul de la intensitat:

$$I = \frac{P}{\cos \varphi \cdot V}$$

On:

P és la potència (W)

V = 380 V és el voltatge requerit (V)

$\cos \varphi = 0,8$

Es calcula la tensió màxima admissible, tenint en compte que la caiguda de tensió és d'un 4,5% per la il·luminació i d'un 6,5% per motors.

$$e = \frac{4,5 \cdot V}{100} \text{ amb } 4,5 \text{ per la il·luminació i } 6,5 \text{ per als motors}$$

A partir de la tensió màxima admissible i la intensitat es calcula la secció dels cables:

$$S = \frac{200 \cdot L \cdot I \cdot \cos \varphi}{K \cdot e}$$

On:

S és la secció del cable (mm²)

L és la longitud del cable (m)

I és la intensitat (A)

K = 56 és una constant

e és la tensió màxima admissible (V)

Finalment, cal escollir la secció del cable tenint en compte el valor trobat i les seccions normalitzades que existeixen que són les següents: 1, 1.5, 2.5, 4, 6, 10, 16, 25, 35, 50, 75, 95, 120, 185 i 240 mm².

11.15.2. Generació de vapor, consum de gas natural i oli tèrmic

- **Oli tèrmic**

Càlcul de la potència calorífica requerida:

$$Q = m \cdot C_p \cdot \Delta T = 3.813,66 \text{ kcal/h}$$

On:

m és el cabal màssic total (kg/s) d'oli tèrmic necessari

C_p = 124,4 J/(kg·°C) és el calor específic de l'oli tèrmic utilitzat. C_p=0,52 kcal/(kg·°C)

ΔT és l'increment de temperatura que ha d'aconseguir la caldera, en aquest cas és 15 °C (100°C - 85°C).

Tenint en compte el 90% del rendiment de la caldera i un factor de seguretat 1,5.

El càlcul del consum de gas natural en la caldera d'oli tèrmic es realitza igual que per la caldera de generació de vapor:

$$C = \frac{Q}{\eta \cdot PCI_{gas}}$$

On:

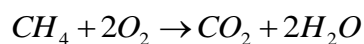
C és el consum (m^3 de gas natural/hora) que és 3,235 m^3/h de gas natural.

Q és la potència nominal necessària (kcal/h), que en el cas calculat és de 3.813,66 kcal/h. Si es té en compte que el rendiment de la caldera és del 90% i un factor de seguretat de 1,5 resulta un potència calorífica de 4.820,87 kcal/h.

PCI és el poder calorífic inferior (10000 Kcal/ m^3 gas natural)

η és el rendiment tèrmic suposant un 90%.

Si fem la suposició de que el gas natural es 100% metà, la reacció de combustió es:



Es calcula l'aire necessari per la combustió en un 15 % d'excés per obtenir una bona combustió sent aquest 35,43 m^3/h d'aire.

11.15.3. Aigua de torre de refrigeració

Inicialment, s'ha calculat les necessitats d'aigua de refrigeració necessàries per refredar els fluids del procés i, a partir del calor a bescanviar i el calor que pot absorbir una torre del model TC-865 (INDUMEC), es calcula el nombre de torres necessàries:

$$Q = m \cdot Cp \cdot (T_{\text{sortidatore}} - T_{\text{entradatore}})$$

$$n^{\circ} \text{ torres de refrigeració} = \frac{\text{calor_bescanvia} [\text{kW}]}{\text{calor} \frac{\text{kW}}{\text{ltorre}}} = \frac{1584028 \text{ kW}}{11779 \frac{\text{kW}}{\text{ltorre}}} \approx 1 \text{ torre}$$

On:

Q és el calor a dissipar (J/s)

m és el cabal màssic d'aigua de refrigeració (kg/s)

Cp = 4180 J/(kg·°C) és el calor específic de l'aigua

T_{sortida torre} = 20°C i T_{entrada torre} = 40°C són les temperatures d'entrada i sortida de les torres.

Cal també realitzar el càlcul de l'aigua necessària de reposició (m_{make-up}), ja que les torres treballen en circuit obert, tenint una sortida d'aire saturat d'humitat i, per tant, perdent certa quantitat d'aigua.

$$m_{\text{make-up}} = \frac{Q_{\text{dissipar}} \frac{\text{kcal}}{\text{h}}}{538 \frac{\text{kcal}}{\text{kg}}} = 0,7 \text{ kg aigua} / \text{h}$$

11.15.4. Circuit frigorífic: Grup de fred

Com ja s'ha comentat, durant el procés és necessari utilitzar aigua freda a més baixes temperatures que la que pot arribar a proporcionar les torres de refrigeració. S'ha decidit disposar de dos tipus d'equip de fred degut als requeriments tèrmics:

1. Proporciona aigua freda a una temperatura de 7 °C i es retorna a l'equip a una temperatura de 12 °C. Utilitzant el model 05-ARIES FC de les de les unitats refredadores d'aigua de l'empresa MTA, que és capaç de subministrar entre 47 i 162 kW. En aquest cas es necessita una potència frigorífica de 17,67 kW.

2. Utilitza aigua glicolada (30% d'etilenglicol) proporcionant una temperatura de $-13\text{ }^{\circ}\text{C}$ retornant-se a $-5\text{ }^{\circ}\text{C}$. Utilitzant el model 04-PHOENIX PLUS de la casa Novair-MTA, que pot aportar una potència frigorífica des de 320 a 1233 kW. En aquest cas, es necessita una potència frigorífica de 536,997 kW.

Un equip de fred treballa en circuit tancat pel qual hi circula un fluid refrigerant. L'equip consta d'un condensador, un evaporador, una vàlvula d'expansió i un compressor, tal i com es pot observar en l'esquema.

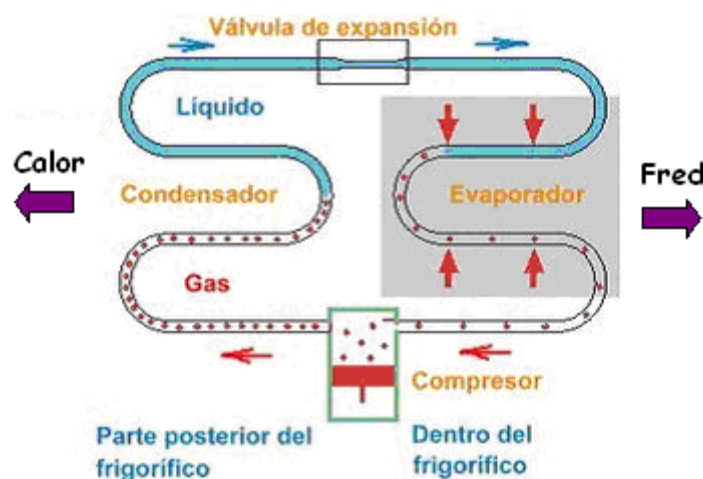


Figura 11.15.4.a. Esquema circuit frigorífic

Per poder escollir l'equip de fred, el primer pas és calcular la potència frigorífica necessària:

$$P_{\text{frigorífica}} = m_{\text{fluid refrigerant}} \cdot C_{p\text{fluid refrigerant}} \cdot (T_{\text{sortida fluid refrigerant}} - T_{\text{entrada fluid refrigerant}})$$

On:

- $P_{\text{frigorífica}}$ és la potència requerida (J/s)
- $m_{\text{fluid refrigerant}}$ és el cabal màssic de fluid refrigerant requerit: aigua o aigua glicolada al 30% (kg/s)
- $C_{p\text{fluid refrigerant}}$ és la capacitat calorífica del fluid refrigerant (J/(kg·°C)). 4180 J/(kg·°C) per l'aigua i 3726 J/(kg·°C) per aigua glicolada.
- $T_{\text{sortida fluid refrigerant}}$ és la temperatura de sortida del fluid refrigerant dels equips (°C). En el cas de l'aigua és $12\text{ }^{\circ}\text{C}$ i en el cas de l'aigua glicolada és $-5\text{ }^{\circ}\text{C}$.
- $T_{\text{entrada fluid refrigerant}}$ és la temperatura d'entrada del fluid refrigerant als equips (°C). En el cas de l'aigua és $7\text{ }^{\circ}\text{C}$ i en el cas de l'aigua glicolada és $-13\text{ }^{\circ}\text{C}$.

12. BIBLIOGRAFIA

Procés en general

- Patent 3,510,527: producció del PNP
- Patent 5,648,535: hidrogenació i acetilació del p-nitrofenol per obtenir paracetamol
- www.freepatentsonline.com
- www.google.com/patents
- www.sciencedirect.com
- Journal of American Chemical Society

Tancs d'emmagatzematge

- **Eugene F. Megyesy**, Manual de recipientes a presión, diseño y cálculo.
- www.harringtonplastics.com
- www.isover.com
- Normativa MIE APQ001
- Normativa MIE APQ006

Tancs de dissolució i reactors

- **Perry's Chemical engineers'handbook**, 7th ed., 1999
- **H. Hartmann et al.**, Numerical Simulation of Solubility Process in a Stirred Tank reactor, Computation Fluid Dynamics in Chemical Reactor Engineering IV, 2005.
- **E.L. Paul**, Handbook of Industrial Mixing: Science and Practice, John Wiley & Sons, 2004

Control i instrumentació

- R.H. Perry i D.W. Green, *Perry's Chemical Engineering Handbook*, McGraw-Hill (1999)
- F.G. Shinskey, *Process Control Systems*, McGraw-Hill.
- www.emersonprocess.com/Rosemount
- www.abb.es
- www.samson.es
- www.ni.com

Canonades, vàlvules i bombes

- **Broun**, Operaciones básicas de ingeniería química.
- **N.P. Waganoff**, Máquinas de transporte.
- **Hutt**, Manual del Ingeniero.
- **R.F: Biasca**, Movimiento y almacenamiento de materiales.
- Catàlegs industrials

Columnes destil·lació

- **McCabe, W.** McGraw-Hill Education, 2005
- **Perry's** McGraw-Hill Education 2007
- **Wankat, Ph., C Kluwer**, Academic Publisers, 1994

Bescanviadors de calor

- **Donald Q. Kern**, Procesos de transferencia de calor.
- **Coulson & Richarson's Chemical Engineering**. Vol 6. R.K. Sinnott.
- **Perry's Chemical engineers' handbook**, 7th ed., 1999

Cristal·lització

- **Ketan D. Samant i Lionel O'Young**, Understanding Crystallization and Crystallizers.
- **Coulson & Richarson's Chemical Engineering**. Vol 6. **R.K. Sinnott**. Vol 2. Particle Technology and Separation Processes Butterworth-Heinemann Ltd., 2002
- **Chemical Process Design and Integration**, R. Smith, Wiley.
- **A.Mermann**, Crystallization Technology Handbook, Second edition.
- **J. W. Mullin**, Crystallization. Butterworth-Heinemann Ltd. 3a edició. Ed. Oxford (1993).
- **Handbook of industrial crystallization**
- Patent 5,648,535
- **Roger A. Granberg, and ke C. Rasmuson**, Article: *Solubility of Paracetamol in Pure Solvents*.
- Patent US6692768
- **Randolph and Larson**, 1988
- **Mersmann and Kind**, 1988
- **Perry's Chemical Engineer's Handbook**, 8th ed. 2007.

- **Neau et al.**, 1997
- **Grant, D.J.W.; Mehdizadeh, M.L, Chow, A.H-L, Fair-brother, J.E.**Int.J Pharm, 1984.
Article calors de cristal·lització de paracetamol.
- **J.W. Mullin**, Crystallization, Butterworth-Heinemann Ltd. 3a edició. Ed. Oxford, 1993.

Ciclons

- **Perry's Chemical engineers'handbook**, 7th ed., 1999
- **Coulson & Richarson's Chemical Engineering**. Vol 6. R.K. Sinnott.
- **Wankat, Ph., C Kluver**, Academic Publisers, 1994

Medi ambient

- **N.J. Hoboken**, Kirk-Othmer Enciclopedia of Chemical Technology, 4th Edition (2004).
- **G. Tchobanoglous and F.L. Burton, F.L.** (revisors), Ingeniería de aguas industriales: tratamiento, vertido y reutilización; Metcalf&Eddy, Inc.
- Directiva 61/271/CEE
- Decret 130/2003
- **Ingeniería Química nº455**, Febrer 2008.
- Real Decreto 1073/2002

Seguretat i higiene

- www.insht.es
- Real Decret 2267/2004

- Normativa MIE APQ001
- Normativa MIE APQ006
- Real Decret 997/2002
- Real decret 773/1997
- Real Decret 886/1988